

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки Физика

Отделение экспериментальной физики

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

Тема работы
Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы $\nu_2$ диоксида серы

УДК 535.338.4:661.811:546.22

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Чжоу Синьтун		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЕН ШБИП	Зятькова А.Г.			

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент, ШИП	Черепанова Н.В.	к. ф. н.		23. 04. 18

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент, ОКД	Ларионова Е. В.	к. х. н.		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ИЯТШ ОЭФ	Лидер А.М.	к. ф.-м. н.		

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
<b>Р1</b>	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОС3+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
<b>Р2</b>	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОС3+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
<b>Р3</b>	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОС3+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
<b>Р4</b>	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОС3+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
<b>Р5</b>	Получить организационно-управленческие навыки при	Требования

	работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	ФГОСЗ+ (ОПК-8, ОПК-9)
<i>Профессиональные компетенции</i>		
<b>Р6</b>	<u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2)
<b>Р7</b>	<u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
<b>Р8</b>	<u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОСЗ+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
<b>Р9</b>	<u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в	Требования ФГОСЗ+ (ПК-9)

	информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	
--	--	--

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

---

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

\_\_\_\_\_ Лидер А.М.

(Подпись)

(Дата)

(Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
150Б41	Чжоу Синьтун

Тема работы:

Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы  $\nu_2$  диоксида серы

Утверждена приказом директора (дата, номер)

21.05.2018 г., 3582/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:

## ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p><b>Исходные данные к работе</b></p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования;</i></p> <p><i>производительность или нагрузка; режим работы</i></p> <p><i>(непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид</i></p> <p><i>сырья или материал изделия; требования к продукту,</i></p> <p><i>изделию или процессу; особые требования к особенностям</i></p> <p><i>функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в</i></p> <p><i>плане безопасности эксплуатации, влияния на</i></p> <p><i>окружающую среду, энергозатратам; экономический</i></p> <p><i>анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объектом исследования являются материнская молекула диоксида серы.</p>
<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с</i></p> <p><i>целью выяснения достижений мировой науки техники в</i></p> <p><i>рассматриваемой области; постановка задачи</i></p> <p><i>исследования, проектирования, конструирования;</i></p> <p><i>содержание процедуры исследования, проектирования,</i></p> <p><i>конструирования; обсуждение результатов выполненной</i></p> <p><i>работы; наименование дополнительных разделов,</i></p> <p><i>подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Обзор литературы по спектроскопическим параметрам молекулы SO<sub>2</sub>.</p> <p>Интерпретация спектра молекулы SO<sub>2</sub>. Решение обратной задачи и получение спектроскопических постоянных.</p> <p>Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»</p> <p>Раздел «Социальная ответственность»</p>
<p><b>Перечень графического материала</b></p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
<p><b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b></p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>	

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Черепанова Н.В.
Социальная ответственность	Ларионова Е. В.
<b>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</b>	

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент, ОЕН ШБИП	Зятькова А.Г.			

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Чжоу Синьтун		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И  
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа 150Б41	ФИО Чжоу Синьтун
------------------	---------------------

Школа Уровень образования	ШБИП Бакалавриат	Отделение Направление/специальность	Экспериментальной физики Физика
------------------------------	---------------------	--	------------------------------------

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических; энергетических; финансовых; информационных; человеческих;</li> <li>2. Нормы и нормативы расходования ресурсов;</li> <li>3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования.</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Стоимость материалов.</li> <li>2. Зарботная плата руководителя проекта.</li> <li>3. Зарботная плата исполнителей проекта.               <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Нормы рабочего времени, выполнения проекта.</li> <li>1. Ставка налога отчисления во внебюджетные фонды.</li> <li>2. Процент дополнительной заработной платы.</li> </ol> </li> </ol>
---	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</li> <li>2. Планирование научно-исследовательских работ</li> <li>3. Составление бюджета внедрения инженерного</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Оценка конкурентоспособности проекта</li> <li>2. Планирование работ в течении осуществления проекта.               <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Планирование и расчёт бюджета научной- исследовательской работы.</li> <li>1. Определение эффективности и перспектив научного исследования.</li> </ol> </li> </ol>
---	--

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Карта сегментирования рынка</li> <li>2. Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений</li> <li>3. Перечень этапов, работ и распределение исполнителей</li> <li>4. Календарный план-график</li> </ol>
---

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ШИП	Черепанова Н. В	к.ф.н		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа 150Б41	ФИО Чжоу Синьтун	Подпись	Дата
------------------	---------------------	---------	------

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б41	Чжоу Синьтун

Школа	ИШЯТ	Кафедра	Экспериментальная физика
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

**Тема дипломной работы:** Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы  $\nu_2$  диоксида серы

<p><b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b></p>	<p>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-вредных проявлений факторов производственной среды ( метеоусловия, вредные вещества,– освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля)</li> <li>-опасных проявлений факторов производственной среды(механической природы, термического</li> <li>–характера, электрической, пожарной и взрывной природы) негативного воздействия на окружающую природную среду</li> <li>– чрезвычайных ситуаций (в основном опасность пожара)</li> </ul>
<p><b>Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:</b></p>	<p>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>а) приводятся данные по оптимальным и допустимым значениям микроклимата на рабочем месте, перечисляются методы обеспечения этих значений</li> <li>б)приводятся данные по допустимым значениям шума на рабочем месте</li> <li>в) приводится 1 из расчетов (расчет освещенности на рабочем месте, расчет потребного воздухообмена на рабочем месте, расчет необходимого времени эвакуации рабочего персонала);</li> <li>г) приводятся данные по реальным значениям электромагнитных полей на рабочем месте, в том числе от компьютера или процессора, если они используются, перечисляются СКЗ и СИЗ;</li> <li>приведение допустимых норм с необходимой размерностью (с ссылкой на</li> </ul>

	<p>соответствующий нормативнотехнический документ);</p> <p>предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства)</p> <p>2 Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:</p> <p>а) механические опасности (источники, средства защиты);</p> <p>б) термические опасности (источники, средства защиты);</p> <p>в) электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита-источники–средства защиты);</p> <p>г) пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства– пожаротушения).</p> <p>3 Охрана окружающей среды:</p> <p>организация безотходного производства (приводится перечень отходов при эксплуатации установки, перечисляются методы улавливания, переработки, хранения и утилизации образовавшихся на вашем производстве промышленных отходов).</p> <p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <p>а) Приводятся возможные для Сибири ЧС; Возможные ЧС: морозы, диверсия</p> <p>разрабатываются превентивные меры по предупреждению ЧС;</p> <p>разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС;</p> <p>разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий</p> <p>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <p>специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства (приводится перечень ГОСТов, СНиПов и др. законодательных документов, использованных в своей работе);</p>
--	--

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

Доцент ОКД	Ларионова Е.К	к.х.н.		
------------	---------------	--------	--	--

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Чжоу Синьтун		

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

---

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение экспериментальной физики

Период выполнения \_\_\_\_\_

Форма представления работы:

бакалаврская работа
---------------------

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН**  
**выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2017	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2017	Объект и методы исследования	15
30.12.2017	Исследование энергетической структуры полосы $\nu_2$ молекулы $SO_2$	20
30.04.2018	Расчёт и аналитический анализ	15
23.05.2018	Социальная ответственность	15
23.05.2018	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2018	Заключение	5

Составил преподаватель:

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Ассистент ОЕН ШБИП	Зятькова А.Г.			

**СОГЛАСОВАНО:**

<b>Руководитель ООП</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н.		

## Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 102 с., 12 рис., 22 табл., 31 источник.

Ключевые слова: ИК-спектры, Фурье-спектроскопия, колебательно-вращательные спектры, спектроскопические параметры, диоксид серы.

Объектом исследования являются материнская молекула диоксида серы.

Целью исследования является получение параметров модели Гамильтониана, корректно описывающей колебательно-вращательное распределение энергетических уровней в полосе  $\nu_2$  диоксида серы.

В процессе исследования проводился анализ экспериментального колебательно-вращательного спектра молекулы  $\text{SO}_2$  методом комбинационных разностей. Было получено около 2500 энергетических переходов, соответствующих полосе  $\nu_2$ . На основе полученных результатов, было рассчитано около 500 энергий верхнего состояния.

В результате процедуры варьирования параметров эффективного гамильтониана был получен набор из 14 спектроскопических параметров (колебательных, вращательных и параметров центробежного искажения). Полученный набор воспроизводит исходные данные с точностью соответствующей экспериментальной.

Полученные результаты используются для пополнения российских и зарубежных баз данных. Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	18
1. Обзор литературы .....	21
1.1 Исследования прошлых лет .....	21
1.2 Электронно-колебательно-вращательный гамильтониан нелинейной молекулы .....	24
1.3 Теория возмущения .....	27
1.4 Эффективный гамильтониан изолированного состояния .....	29
2. Объект и методы исследования.....	34
2.1 Общая информация о молекуле SO <sub>2</sub> .....	34
2.2 Метод регистрации спектров .....	37
2.3 Метод комбинационных разностей .....	40
2.4 Модель эффективного Гамильтониана .....	42
3. Результаты проведенного исследования .....	44
3.1 Детали эксперимента .....	44
3.2 Интерпретация экспериментальных спектров .....	45
3.3 Решение обратной спектроскопической задачи .....	48
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение ..	51
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения .....	51
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования .....	51

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений	51
4.1.3 Технология QuaD	53
4.1.4 SWOT-анализ	55
4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	58
4.3 Планирование научно-исследовательских работ	58
4.3.1 Структура работ в рамках научного исследования	58
4.3.2 Определение трудоёмкости выполнения работ	60
4.3.3 Разработка графика проведения научного исследования	61
4.3.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	65
4.3.4.1 Расчёт материальных затрат НТИ	65
4.3.4.2 Расчёт затрат на специальное оборудование для экспериментальных работ	65
4.3.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы	66
4.3.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	68
4.3.4.5 Накладные расходы	69
4.3.4.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	69
4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	70

5. Социальная ответственность при исследовании тонкой колебательно-вращательной структуры спектра поглощения молекулы SO <sub>2</sub> ..	72
5.1 Производственная безопасность в компьютерном помещении .....	73
5.1.1 Анализ вредных производственных факторов и обоснование мероприятий по их устранению .....	75
5.1.2 Анализ опасных производственных факторов и обоснование мероприятий по их устранению .....	85
5.2 Эргономические условия работы на ПЭВМ .....	87
5.2.1 Требования к помещениям для работы с ПЭВМ .....	87
5.2.2 Общие требования к организации и оборудованию рабочих мест пользователей ПЭВМ .....	89
5.2.3 Режим труда и отдыха при работе с ПЭВМ .....	91
5.3 Экологическая безопасность (Охрана окружающей среды) .....	92
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	94
5.5 Заключение социальной ответственности .....	96
Заключение .....	98
Список использованных источников .....	99

## Введение

Развитие современной колебательно-вращательной спектроскопии молекул даёт возможность более точно описывать информацию, полученную из экспериментов, и, путем интерпретации спектров, исследовать основные характеристики молекул, которые дают возможность для исследования различных эффектов внутримолекулярной природы. Благодаря интерпретации спектров можно определить систему уровней энергии молекулы и найти спектроскопические постоянные, структурные параметры и потенциальную функцию исследуемой молекулы [1].

Предметом исследования в данной работе является материнская молекула диоксида серы  $^{32}\text{SO}_2$ . Спектроскопическая информация о данной молекуле применяется в физике, планетологии, атмосферной оптике и т.д.  $\text{SO}_2$  имеет применение в кругах современной науки, таких как химия, астрофизика, лазерные технологии и др. Так, например, диоксид серы, выбрасываемый в атмосферу в процессе извержения вулканов, потом превращается серную кислоту  $\text{H}_2\text{SO}_4$ . Это, в свою очередь, влияет на химические процессы в атмосфере и климате [2-6]. Также  $\text{SO}_2$  является одним из основных звеньев атмосферного цикла Земли. Чтобы решать задачу дистанционного мониторинга и обнаружения диоксида серы, нужно иметь информацию о тонкой структуре спектров поглощения молекулы в различных областях электромагнитного диапазона, в частности, инфракрасной [7].

Сернистые соединения, в частности диоксид серы, долгое время считались основными загрязнителями воздуха. Загрязнение соединений серы

выбрасывается в атмосферу путем сжигания угольного топлива, нефти и природного газа, а также при выплавке металлов и при производстве серной кислоты. Ангидрид серы образуется путем постепенного окисления сернистого ангидрида кислородом воздуха с участием света. Конечным продуктом реакции является аэрозоль серной кислоты в воздухе, раствор в дождевой воде (в облаках). Попадая на землю, он подкисляет почву, усугубляет заболевания дыхательных путей, оказывает скрытое ингибирующее действие на здоровье человека. Осаждение аэрозолей серной кислоты из дымовых вспышек химических растений чаще наблюдается с низкой облачностью и высокой влажностью воздуха [8]. Следует также отметить, что диоксид серы имеет максимум в спектре поглощения света в ультрафиолетовой области (190-220 нм), что совпадает с максимумом в спектре поглощения озона. Это свойство диоксида серы позволяет утверждать, что присутствие этого газа в атмосфере также оказывает положительное влияние, предотвращая возникновение и развитие рака кожи человека. Двуокись серы в атмосфере Земли значительно снижает влияние парниковых газов (углекислого газа, метана) на рост атмосферной температуры.

Первые методы анализа воздуха предназначались именно для определения в воздухе диоксида серы или сульфидов. Рекомендуемые предельно допустимые концентрации для всех сернистых соединений имеют один и тот же порядок — 10 %. Однако при постоянном контроле окружающей среды необходимо определять эти соединения при содержании их меньше 10 %,

поскольку это соответствует обычному содержанию сернистых соединений в атмосфере.

**Целью работы** является получение параметров модели Гамильтониана, корректно описывающей колебательно-вращательное распределение энергетических уровней в полосе  $\nu_2$  диоксида серы.

Для достижения поставленных целей были определены следующие **задачи**:

1. Исследование колебательно-вращательной структуры полосы  $\nu_2$  молекулы  $^{32}\text{SO}_2$  в спектральном диапазоне от  $400\text{ см}^{-1}$  до  $710\text{ см}^{-1}$ .
2. Решение обратной спектроскопической задачи и определение спектроскопических параметров указанной полосы.

## 1. Обзор литературы

### 1.1 Исследования прошлых лет

Исследование молекулы диоксида серы, в том числе и исследование колебательно-вращательной структуры, активно проводится с момента, когда исследуемая молекула была обнаружена в составе межзвездных облаков. В настоящее время, Фурье-спектроскопия позволяет с высокой точностью зарегистрировать экспериментальные спектры, что так же увеличивает точность полученных результатов – определение энергетической структуры молекулы и ее внутренних свойств.

В 1985 году, Ф. Ловас проделал большую работу [9], объединив ранее полученную и добавив новую информацию об основном состоянии и состоянии ( $\nu_2 = 1$ ) молекулы  $\text{SO}_2$ . Следует отметить, что был проанализирован широкий диапазон частот – от 100 МГц до 650 ГГц. Максимальное значение квантового числа  $J_{\text{max}}$  составило 60. На основе полученной информации был получен набор спектроскопических параметров, включающих в себя вращательные постоянные и параметры центробежного искажения, различных порядков.

В 1987 году, Л. Кукерт, А. Г. Маки и В. М. Больсон провели следующий эксперимент [10]: молекула  $\text{SO}_2$  была исследована при помощи инфракрасного излучения в диапазоне 450 - 602  $\text{cm}^{-1}$ . Экспериментальное разрешение составило 0,005  $\text{cm}^{-1}$ . В исследуемом диапазоне расположены фундаментальная полоса  $\nu_2$  и «горячая» полосы  $2\nu_2-\nu_2$ , которые являются полосами  $b$  – типа. В результате анализа экспериментального спектра, было определено

3007 энергетических переходов, на основе которых в дальнейшем была проведена процедура варьирования спектроскопических параметров. Среднеквадратичное отклонение для полученного набора параметров составило  $0,0004 \text{ см}^{-1}$ , что соответствует экспериментальному разрешению.

В 1993 году, Д. Фло и др. исследовали инфракрасные спектры высокого разрешения [11]. Используя инфракрасные спектры высокого разрешения, был проведен повторный анализ полос  $\nu_2$ ,  $2\nu_2 - \nu_2$ ,  $\nu_1$  и  $\nu_3$ . Для исследования состояния (010) был выбран гамильтониан типа Уотсона. Но для того чтобы исследовать состояния (020), (100) и (001) необходимо рассмотреть явно условия резонансного взаимодействия. Между состояниями (020) и (100) было учтено взаимодействие типа Ферми, в то время как между состояниями (100) и (001) – типа Кориолиса.

В 2015 году, Синьчуань Хуан и т. д. измерили эмпирические списки инфракрасных линий для пяти изотопологов  $\text{SO}_2$ :  $^{32/33/34/36}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$  [12]. Они использовали опубликованную эмпирически уточненную потенциальную энергетическую поверхность и *ab initio* расчеты поверхности дипольного момента. На основе проведенных расчетов, были определены списки инфракрасных линий для молекулы  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ ,  $^{33}\text{S}^{16}\text{O}_2$ ,  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ ,  $^{36}\text{S}^{16}\text{O}_2$ , и  $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ . Полученные данные соответствуют диапазону значений квантового числа  $J = 0 - 80$  и охватывают колебательно-вращательные энергии до  $8000 \text{ см}^{-1}$ . Для характеристики качества проведенного исследования, полученные результаты для изотопологов  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{33}\text{S}^{16}\text{O}_2$  были сравнены с данными, опубликованными в базах данных (NITRAN2012 и CDMS). При сравнении

данных обнаружено в основном расхождение для больших значений квантовых чисел  $J/K_a$ . Таким образом, делается вывод о точности результатов для других изотопологов.

В 2015 году, Х. Мюллер и С. Брюнкен провели исследования тонкой вращательной структуры диоксида серы  $\text{SO}_2$  для основного и первого возбужденного состояния [13]. Было зарегистрировано около 150 изолированных вращательных переходов в диапазоне до 2 ТГц. Максимальное значение квантовых чисел  $J$  и  $K_a$  было достигнуто 92/23 и 81/21 для основного состояния и состояния ( $v_2 = 1$ ), соответственно. На основе полученной информации, были улучшены спектроскопические параметры для исследуемых состояний.

Колебательно-вращательная структура молекулы  $\text{SO}_2$  активно исследуется с 1985. Так как полуэмпирические методы исследования колебательно-вращательных спектров напрямую зависят от точности эксперимента, то улучшение техники и методики эксперимента позволяет с более высокой точностью определить положение линий в спектре, что в свою очередь влияет на значение спектроскопических параметров молекулы. Более того, повторное исследование спектров даёт возможность определить большее количество энергетических переходов и определить запрещенные переходы, что с количественной точки зрения так же положительно влияет на точность определяемых параметров.

## 1.2 Электронно-колебательно-вращательный гамильтониан нелинейной молекулы

Известно, что решение уравнения Шредингера непосредственным образом зависит от того, в каком виде выбирается гамильтониан молекулы  $H$ . Поэтому не менее важной задачей, чем решение уравнение Шредингера, является задача построения гамильтониана молекулы.

С физической точки зрения молекула представляет собой систему, состоящую из ядер атомов и электронов. Поэтому для точного описания энергетических уровней молекулы необходимо решить уравнение Шредингера с гамильтонианом, зависящим от координат и спинов всех частиц, образующих молекулу, и который учитывает все виды взаимодействий между эти частицы. Построение такого гамильтониана не является простой научной задачей. Реальный путь к теоретическому описанию спектра молекул заключается в использовании различных видов приближений при построении гамильтонианов молекул.

Как правило, в молекулярной спектроскопии используются нерелятивистские гамильтонианы, т. е. Гамильтонианы следующего вида [14]:

$$H = T_{\text{яд}} + T_{\text{эл}} + V \quad (1)$$

где  $T_{\text{яд}}$  и  $T_{\text{эл}}$  – операторы кинетической энергии ядер и электронов соответственно;  $V$  – оператор потенциальной энергии молекулы, включающей энергию электрического притяжения электронов к ядрам и энергию между

электронного и межъядерного отталкивания. Следовательно, операторы  $T_{\text{яд}}$ ,  $T_{\text{эл}}$  и  $V$  имеют вид:

$$\begin{aligned} T_{\text{яд}} &= \frac{-\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right), \\ T_{\text{эл}} &= \frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_i \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \\ V &= \sum_{\substack{i,j \\ i>j}} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{\substack{N,N' \\ N>N'}} \frac{z_N z_{N'}}{r_{NN'}} - \sum_{i,N} \frac{e z_N}{r_{iN}}. \end{aligned} \quad (2)$$

где  $m_N$  и  $m_e$  – массы ядер и электронов;  $z_N$  и  $e$  – заряды ядер и электрона;  $r_{ab} = [(x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2 + (z_a - z_b)^2]^{1/2}$  – расстояние между  $a$ -й и  $b$ -й частицами. Заметим, что  $x_N$ ,  $x_i$  – это координаты ядер и электронов в декартовой пространственно-фиксированной системе.

Суть преобразования заключается в следующем: Гамильтониан молекулы, как и любая функция системы обобщенных координат  $x_n$  и производных по ним  $\partial/\partial x_n$ , всегда может быть преобразована в систему новых обобщенных координат  $q_m$ , если известен закон преобразования для координат и их производных [15]:

$$x_n = f_n(q_m), \partial/\partial x_n = \Phi_n(q_m, \partial/\partial q_l). \quad (3)$$

Как известно, если преобразование (3) неособенное, т. е. Якобиан преобразования  $D(x_1, \dots, x_n)/D(q_1, \dots, q_n)$ , который есть определитель матрицы, составленной из величин  $\partial/\partial q_m$ , отличен от нуля, то соотношения типа (3) для производных могут быть найдены всегда, причём единственное преобразование координат задается в виде (3), (т. е. старые координат выражаются как функции новых). Для определения производных  $\partial/\partial x_n$  необходимо найти матрицу, обратную матрице  $\partial/\partial q_m$ , что в некоторых случаях является сложной задачей.

В этой работе формулы типа (3) определяются из следующих соображений. Предположим, что координаты  $x_n$  (следовательно, и  $q_m$ ) есть функция некоторого параметра  $t$  (например времени). Тогда можно показать, что формулы (3), выражающие производные  $\partial/\partial x_n$  (или с точностью до множителя  $-i\hbar$  операторы импульсов  $-i\hbar \partial/\partial x_n$ ) через производные  $\partial/\partial q_m$  (оператор  $P_m$ ) и координаты  $q_m$ , имеют точно такой же вид, что и формулы, выражающие классические величины  $p_{x_n}$  через  $q_m$  и  $p_{q_m}$ . Здесь

$$P_{x_n} = \partial L / \partial \dot{x}_n, \quad (4)$$

$$p_{q_m} = \partial L / \partial \dot{q}_m, \quad (5)$$

$$\dot{x}_n = dx_n / dt,$$

$$\dot{q}_m = dq_m / dt, \quad (6)$$

а  $L$  – произвольный в общем случае полином переменных  $\dot{x}_n$  (или  $\dot{q}_m$ ):

$$L = \sum_{i \dots j} a_{i \dots j}(x_n) \dot{x}_i \cdot \dots \cdot \dot{x}_j + \dots + \sum_i a_i(x_n) \dot{x}_i + a(x_n). \quad (7)$$

Подход к задаче получения колебательно-вращательного гамильтониана может быть использован для преобразования не только оператора в виде (1) - (2), но и выражения более сложной формы

$$H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4, \quad (8)$$

где  $H_1$  – оператор, описывающий кинетическую энергию и электростатическое взаимодействие электронов и ядер;  $H_2$  – оператор описывающий энергию магнитного взаимодействия всех частиц;  $H_3$  – оператор описывающий спин-орбитальные взаимодействия и  $H_4$  – спин-спиновые взаимодействия.

### 1.3 Теория возмущения

В квантовой механике только ограниченное число задач может быть решено точно, как это было сделано, например, для осциллятора [13]. Для нахождения решения волнового уравнения во многих случаях приходится прибегать к различным приближённым методам. Одним из таких методов, получившим наиболее широкое распространение, является теория возмущений.

Предположим, что гамильтониан системы может быть записан в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{h} \quad (9)$$

где  $\hat{H}_0$  — оператор невозмущённой системы,  $\hat{h}$  — оператор возмущения.  $\hat{h}$  — малый оператор в сравнении с  $\hat{H}_0$ .

С другой стороны, колебательно-вращательный Гамильтониан можно представить в следующем виде [14]:

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(k^n) \quad (10)$$

где  $H_n(k^n)$  - оператор порядка малости  $k^n$  по отношению к оператору  $H_0$ .

Решение уравнение Шредингера с оператором  $\hat{H}_0$  известно  $-\hat{H}_0\psi_n^0 = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$  (т.е. для любого  $n$  известны  $\psi_n^{(0)}$  и  $E_n^{(0)}$ ), собственные функции оператора  $\hat{H}_0$  образуют ортонормированный базис

$$\int \psi_n^{(0)}(r)\psi_m^{(0)}(r)dv = \delta_{nm} \quad (11)$$

Решение уравнения Шредингера с оператором  $\hat{h}$  есть

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + E_n^{(3)} + \dots \quad (12)$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(2)} \psi_k^{(0)} + \dots \quad (13)$$

Подставив, полученные результаты (12-13) и (10) в уравнение (9), получим следующее:

$$\begin{aligned} & (\widehat{H}_0 + \hat{h}) \left( \psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(2)} \psi_k^{(0)} \right) = \\ & = \left( E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + E_n^{(3)} + \dots \right) \left( \psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} \right. \\ & \left. + \sum_k C_{nk}^{(2)} \psi_k^{(0)} + \dots \right) \end{aligned}$$

Сравнение величин по порядкам малости:

$$\alpha^0 \quad \widehat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

$$\alpha^1 \quad \widehat{H}_0 \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \hat{h} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

и т.д.

Для определения второго порядка теории возмущений, необходимо определить поправку к энергии системы. Ограничиваясь в разложении волновой функции  $\psi$  и энергии  $E$  членами до второго порядка малости включительно и подставляя их в уравнение Шредингера, получаем

$$(E_n^0 - H^0) \psi_n'' = -(E_n' - V') \psi_n' - E_n'' \psi_n^0$$

Учитывая, что решение  $\psi_n^{0*}$  однородного уравнение должно быть ортогональным к правой части:

$$\int \psi_n^{0*} \psi_n' d^3x = 0, \quad (14)$$

и находим поправку второго порядка к энергии системы:

$$E_n'' = \int \psi_n^{0*} V' \psi_n' d^3x = \sum_{n'} \frac{|V'_{n'n}|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0} \quad (15)$$

В традиционной теории возмущений неизвестные величины (поправки на собственные энергии и волновые функции) получаются в виде суммы различных комбинаций матричных элементов, т.е. *чисел*. В то же время матричные элементы операторов возмущений по собственным функциям оператора нулевой аппроксимации уже не являются числами, а операторами. В общем случае эти операторы не коммутируют и, как следствие, неэрмитовы вклады в оператор энергии должны быть учтены в теории. По этой причине неприемлемое использование результатов обычной теории возмущений для рассматриваемых молекулярных задач неприемлемо. Решение состоит в использовании метода эффективных операторов [14].

#### 1.4 Эффективный гамильтониан изолированного состояния

Суть представленного метода может быть выражена следующим образом: решение уравнения Шрёдингера с начальным гамильтонианом представляется невозможным или является слишком сложной задачей. Тогда необходимо построить эрмитов оператор  $H'$ , удовлетворяющий следующим требованиям:

– решение уравнения Шрёдингера с этим оператором определяется в явном виде;

– множество  $B'$  всех решений уравнения Шрёдингера с оператором  $H'$  совпадает с неким подмножеством  $B$  множества  $A$  всех решений уравнения Шрёдингера с исходным оператором  $H$ .

Оператор  $H'$ , удовлетворяющий этим требованиям, называется эффективным на подмножестве  $B$  гамильтонианом.

Задачи построения эффективного гамильтониана  $\tilde{H}_{\alpha_0\alpha_0}$  анализа состояния  $|\alpha_0\rangle = 0$ . Когда  $\tilde{H}_{\text{эфф}}$  вырождается в один оператор  $\tilde{H}_{00}$ , выполняется два условия:

$$\begin{aligned}\langle 0|\tilde{H}|\alpha\rangle &\equiv \langle 0|G^+HG|\alpha\rangle = 0 \\ \langle \alpha|\tilde{H}|0\rangle &\equiv \langle \alpha|G^+HG|0\rangle = 0\end{aligned}\quad (16)$$

здесь  $G$  является произвольным унитарным оператором.

Можно построить оператор  $\tilde{H}$

$$\tilde{H} = G^+HG \quad (17)$$

где  $G$  — произвольный унитарный оператор (унитарное преобразование не меняет спектр собственных значений оператора). Оператор  $(G-1)$  должен быть малым по сравнению с единичным оператором. Это условие будет выполняться, если оператор  $G$  выбрать в виде

$$G = \exp(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(x^n)) \quad (18)$$

где  $g_n = g_n(a,b)$  — малые эрмитовы операторы порядка  $x^n$  (фраза «малые операторы порядка  $n$ » понимается, так же, как и выше см. Начало параграфа)

Оператор  $G$  выберем таким образом, чтобы все элементы типа  $\langle \alpha^0|H'|\beta^0\rangle$  или  $\langle \alpha^0|H'|\beta^0\rangle$  обратились в нули.

$$\langle \alpha | H | \beta \rangle = \begin{pmatrix} & 0 & 0 & \dots \\ \tilde{H}_{эфф} & \dots & \dots & \dots \\ & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & x & x & \dots \end{pmatrix} \quad (19)$$

Условия (16) являются ничем иным, как уравнениями для определения оператора  $G$ . Иными словами, если система уравнений (16) имеет решение, то оказывается возможным построить эффективный оператор. Причем, в соответствии с определением этим эффективным оператором  $\tilde{H}_{00}$  будет оператор

$$\tilde{H}_{00} = \langle 0 | \tilde{H} | 0 \rangle \equiv \langle 0 | G^+ H G | 0 \rangle \quad (20)$$

Выполняется условием (1) функции  $G|0\rangle|A\rangle$ , где  $|0\rangle$  – собственные функции оператора  $H_0$ , а  $|A\rangle$  собственные функции исходного оператора  $H$ . Предварительно заметим, что соотношения (16) и (17) можно объединить следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \tilde{H} - H_0 | \alpha \rangle &= 0 \\ \langle \alpha | \tilde{H} - H_0 | 0 \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (21)$$

где  $\alpha$  — любая (в том числе и  $\alpha=0$ ) из собственных функций оператора  $H_0(\alpha)$ .  $H_0$  не зависит в силу условия (17) от координат  $\alpha$

Определим оператор  $G$ , удовлетворяющий соотношениям (16). Этот оператор можно считать заданным, если будет известны все его операторные матричные элементы  $\langle \alpha | G | \beta \rangle$  на собственных функциях оператора  $H_0$  начального приближения. С другой стороны, оператор  $G$  будет задан, если

определить величины  $\langle \alpha | g_n | \beta \rangle$  для произвольных значений функций  $\langle \alpha |$  и  $| \beta \rangle$ .

Для того чтобы определить эти величины  $\langle \alpha | g_n | \beta \rangle$  подставим (18) в (16) и используем формулу Хаусдорфа, которая позволяет записать операторную экспоненту (18), в виде ряда

$$G = 1 + i \sum_{n=1}^{\infty} g_n + \frac{1}{2} (i \sum_{n=1}^{\infty} g_n)^2 + \dots \quad (22)$$

В результате получим для  $\alpha \neq 0$

$$\begin{aligned} \langle \alpha | h + [H_0, i g_1] | 0 \rangle &= 0 \\ \langle \alpha | [h, i g_1] + \frac{1}{2} [[H_0, i g_1], i g_1] + [H_0, i g_2] | 0 \rangle &= 0 \\ \left\langle \alpha \left| \begin{aligned} &[h, i g_2] + [H_0, i g_3] + \frac{1}{2} [h, i g_1], i g_1 + \frac{1}{2} [[H_0, i g_2], i g_1] + \\ &\frac{1}{2} [[H_0, i g_1], i g_2] + \frac{1}{6} [[[H_0, i g_1], i g_1], i g_1] \end{aligned} \right| 0 \right\rangle &= 0 \end{aligned}$$

и так далее.

Пользуемся

$$\begin{aligned} &\left[ 1 - i g_1 - i g_2 - i g_3 + \frac{1}{2} (i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) - \frac{1}{6} (i g_1 + i g_2 + \right. \\ &\quad \left. i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) \right] (H_0 + h) [1 + i g_1 + i g_2 + i g_3 + \\ &\quad \frac{1}{2} (i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) - \\ &\quad \frac{1}{6} (i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3)] \quad (23) \end{aligned}$$

Молекула  $^{34}\text{SO}_2$  принадлежит к группе симметрии  $C_{2v}$  и является молекулой типа асимметричного волчка, имея три нормальных колебания. Рассмотрим отдельно переход с основного состояния на состояние (010), т.е.

когда возбуждено второе колебание  $\nu_2$ . Учитывая условия на унитарные операторы, найдем явный вид матричного элемента  $\langle 010 | ig_n | \alpha \rangle$ . Систематизируем формулу (23) по порядкам малости. Для первого порядка малости уравнение примет вид:

$$\langle 010 \left| H_0 | \beta \rangle \langle \beta | ig_1 | \alpha \rangle + \langle 010 | h | \alpha \rangle - \sum_{\gamma} ig_1 | \gamma \rangle \langle \gamma | H_0 \right| \alpha \rangle = 0$$

Для второго порядка:

$$\langle (010) \left| \begin{array}{l} 1 * H_0 * ig_2 + 1 * h * ig_1 - ig_1 * H_0 * ig_1 - ig_1 * h * 1 - ig_2 * H_0 * 1 + \\ + 1 * H_0 * \frac{1}{2} (ig_1)^2 \end{array} \right| \alpha \rangle$$

и получим

$$\langle 010 | ig_1 | \alpha \rangle = \frac{\langle 010 | h | \alpha \rangle}{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{010}}$$

$$\langle 010 | ig_2 | \alpha \rangle = \sum_{\beta} \frac{\langle 010 | ig_1 | \beta \rangle \langle \beta | h | \alpha \rangle - \langle 010 | h | 010 \rangle \langle 010 | ig_1 | \alpha \rangle}{(\varepsilon_{010} - \varepsilon_{\alpha})^2}$$

## 2. Объект и методы исследования

### 2.1 Общая информация о молекуле SO<sub>2</sub>

Молекула SO<sub>2</sub> является асимметричным волчком в *A*-редукции и *I'*-представлении. Её вращательные постоянные *A*, *B*, *C* – разные. Значением параметра симметрии определяется по формуле:

$$k = (2B - A - C)/(A - C) \cong -0.860, \quad (24)$$

$$A = \frac{h}{8\pi^2 c I_A}, \quad B = \frac{h}{8\pi^2 c I_B}, \quad C = \frac{h}{8\pi^2 c I_C}, \quad (25)$$

где *I<sub>A</sub>*, *I<sub>B</sub>*, *I<sub>C</sub>* – главные моменты инерции в порядке возрастания.

На основании вышеописанного можно охарактеризовать молекулу SO<sub>2</sub> с точки зрения ее симметричных свойств. Симметрия молекулы SO<sub>2</sub> изоморфна точечной группе *C<sub>2v</sub>*. На рисунке 1 представлена её равновесная структура.

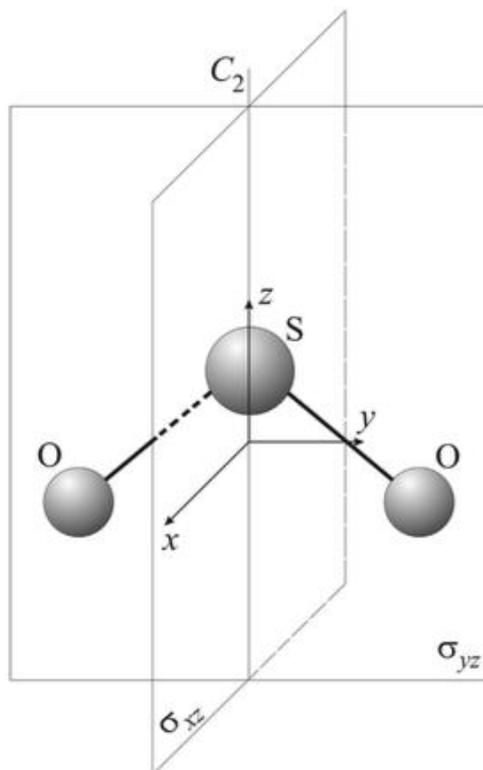


Рисунок 1 - Равновесная геометрия молекулы SO<sub>2</sub> [16]

Точечная группа  $C_{2v}$  имеет 4 элемента симметрии  $E, C_2, \sigma_v(xz), \sigma_v(yz)$  (таблица 1), таким образом, представленная группа содержит одну ось симметрии  $C_2$ , которая совпадает с высотой пирамиды, и 2 плоскости симметрии  $\sigma_v$ , которые проходят через ось  $C_2$ .

Таблица 1 - Характеры группы  $C_{2v}$  [14]

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	Базис	
$A_1$	1	1	1	1	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	-1	$R_z$	$xy$
$B_1$	1	-1	1	-1	$x, R_y$	$xz$
$B_2$	1	-1	-1	1	$y, R_x$	$yz$

Структура молекулы  $SO_2$  совпадает с изначальной структурой при выполнении следующих операций:

1. тождественной операцией  $E$ , рисунок 2;

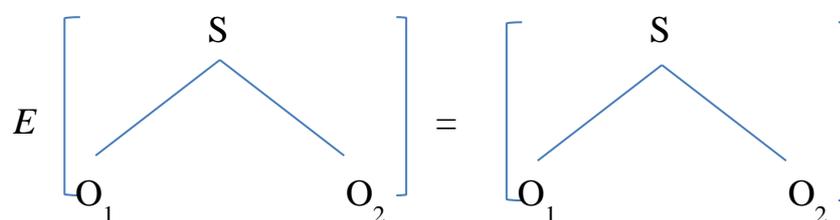


Рисунок 2 – Тождественная операция  $E$

2. операция вращения на  $180^\circ$  вокруг перпендикулярной оси  $z$ , которые мы обозначим символом  $C_{2z}$  соответственно, рисунок 3;

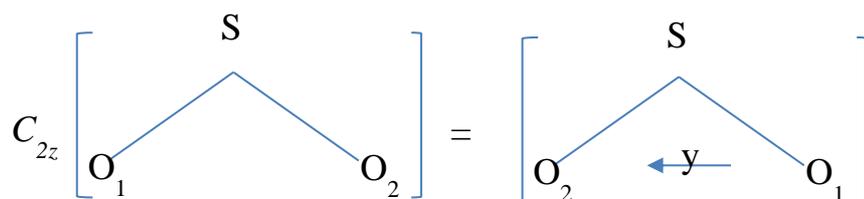


Рисунок 3 – Ось симметрии  $C_2$

3. операция отражения в трех взаимно перпендикулярных плоскостях  $\sigma_{xz}$  и  $\sigma_{yz}$ , определяемых осями  $(x, z)$ , и  $(y, z)$ , соответственно, рисунок 4.

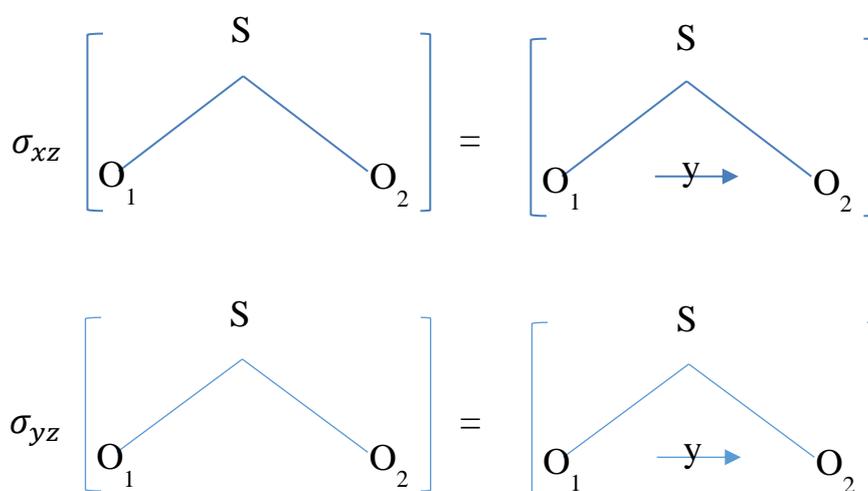


Рисунок 4 – Две плоскости симметрии  $\sigma_v$

Свойства симметрии, представленные в таблице 1, были использованы для определения симметрии нормальных колебаний и, как следствие, правил отбора для исследуемой полосы:  $q_\lambda \in A_1$  для  $\lambda = 1, 2$ , и  $q_\lambda \in B_1$  для  $\lambda = 3$ . Для наглядности на рисунке 5 приведены нормальные колебания молекулы типа  $XU_2$  и соответствующие им симметрии.

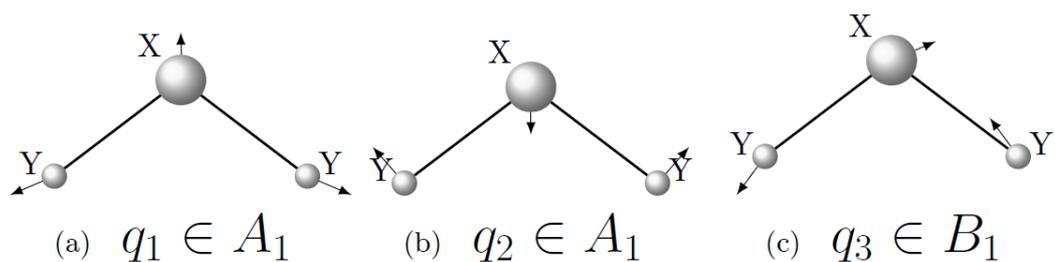


Рисунок 5 – Форма нормальных колебаний молекул типа  $XY_2$

Как уже было отмечено выше симметрия молекулы так же определяет тип полосы и правила отбора для квантовых чисел. Таким образом:

1. если  $(\nu\Gamma) \otimes (\nu'\Gamma') = A_1$ , тогда соответствующая полоса —  $a$  - типа и правила отбора имеют вид:  $\Delta J = 0, \pm 1$ ;  $\Delta K_a = \text{чет.}$ ;  $\Delta K_c = \text{нечет.}$ ;

2. если  $(\nu\Gamma) \otimes (\nu'\Gamma') = B_1$ , тогда соответствующая полоса —  $b$  - типа и правила отбора имеют вид:  $\Delta J = 0, \pm 1$ ;  $\Delta K_a = \text{нечет.}$ ;  $\Delta K_c = \text{нечет.}$ ;

3. если  $(\nu\Gamma) \otimes (\nu'\Gamma') = B_2$ , тогда соответствующая полоса —  $c$  - типа и правила отбора имеют вид:  $\Delta J = 0, \pm 1$ ;  $\Delta K_a = \text{нечет.}$ ;  $\Delta K_c = \text{чет.}$

Для молекулы  $SO_2$ , исследуемая полоса  $\nu_2$  является полосой  $b$  - типа и обладает следующими правилами отбора:

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \pm 1; \Delta K_c = \pm 1$$

## 2.2 Метод регистрации спектров

Фурье - спектрометр (рисунок 6) - этот интерферометр Майкельсона, освещаемый излучением в заданном диапазоне. В данном устройстве одно из зеркал движется с постоянной скоростью. В результате получается кривая

зависимости сигнала фотодетектора от разности хода интерферометра. Даная кривая преобразовывается в соответствии с Фурье преобразованиями и, как результат, получается распределение интенсивности по частотам (длины волн). В некоторых случаях такой сложный метод более эффективен, чем прямой анализ спектра.

Основным элементом Фурье – спектрометра, как уже было отмечено, является интерферометр Майкельсона. В качестве источника используется когерентный источник излучения с определенной длиной волны. Когда разность хода двух лучей, поступающих в приемник, равна  $\lambda / 2$  (т. е. лучи попадают в противофазу), интенсивность света, зарегистрированная приемником, близка к нулю. Когда правое зеркало интерферометра Майкельсона перемещается, изменяется разность лучей и изменяется интенсивность света, регистрируемая приемником. Очевидно, что интенсивность света является максимальной, когда разность хода кратна длине волны  $\lambda$ .

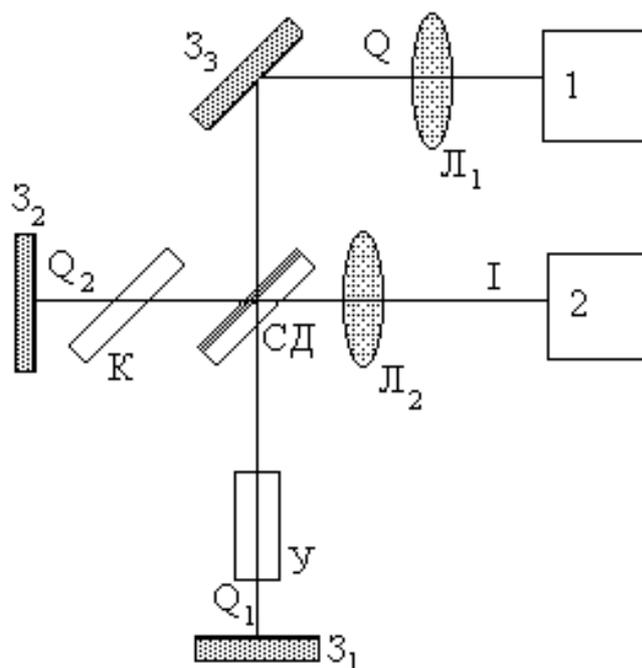


Рисунок 6 – Установка Фурье-спектрометра

1 - источник света; 2 - фотоприемник; 3 - зеркала; С.Д.- светоделитель; К – компенсатор; У - устройство изменения разности хода; Л - линзы (не обязательны)

Когда зеркало перемещается с постоянной скоростью, на выходе приемника будет наблюдаться электрический сигнал синусоидальной формы. Более того, период синусоиды зависит от длины волны источника и от амплитуды интенсивности источника. Если на входе присутствует некогерентный источник, то каждая длина волны в спектре источника света будет давать синусоиду на выходе приемника. Таким образом, на выходе приемника получится комплексный сигнал. Когда обратное преобразование Фурье выполняется по принятому сигналу, можно получить спектр входного электрического сигнала, который также является спектром излучения

источника (т. е. интенсивностью излучения источника на разных длинах волн) [17].

### **2.3 Метод комбинационных разностей**

Анализ, зарегистрированных с помощью Фурье-спектрометра, данных производится методом комбинационных разностей. Основная идея данного метода заключается в том, что рассматриваются переходы между вращательными уровнями основного и возбуждённого колебательных состояний. Известно, что обязательно существует несколько переходов с вращательных уровней основного колебательного состояния на один и тот же уровень возбуждённого колебательного состояния (рисунок 7). Обычно, основное колебательное состояние известно с высокой точностью из анализа микроволновых спектров (вращательные переходы внутри основного колебательного состояния). В свою очередь, колебательно – вращательный спектр содержит в себе информацию о переходах между энергетическими уровнями. Таким образом, зная тонкую структуру основного состояния и зная, что переходы совершаются на один и тот же уровень возбуждённого состояния, остается только опередить советующие переходы из спектра. Для этого, создается «линейка». «Линейка» создается таким образом, что расстояния между делениями соответствуют вращательной структуре основного колебательного состояния (рисунок 8). Передвигая заданную «линейку» по

экспериментальному спектру, обнаруживаются линии (количество которых определяется количеством делений линейки), которые совпадают с делениями.

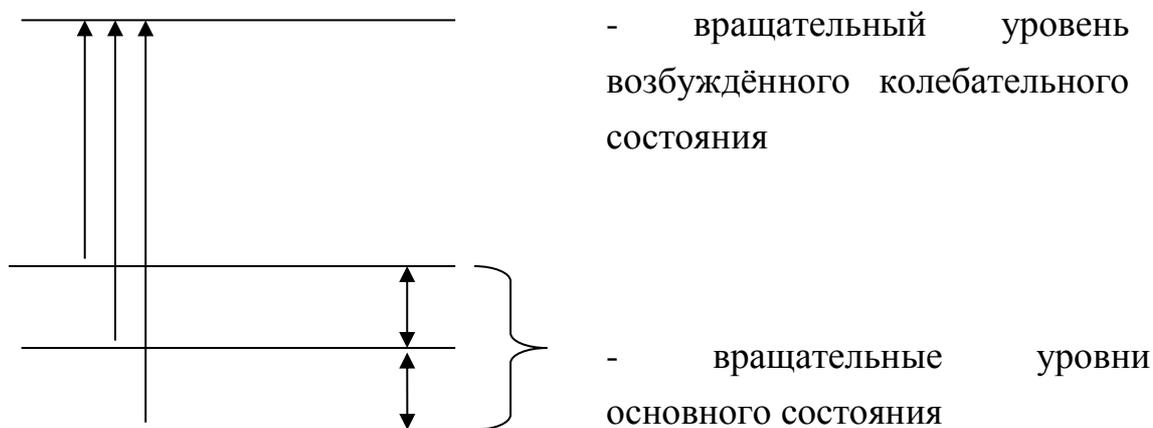


Рисунок 7 - Переход с вращательных уровней основного колебательного состояния

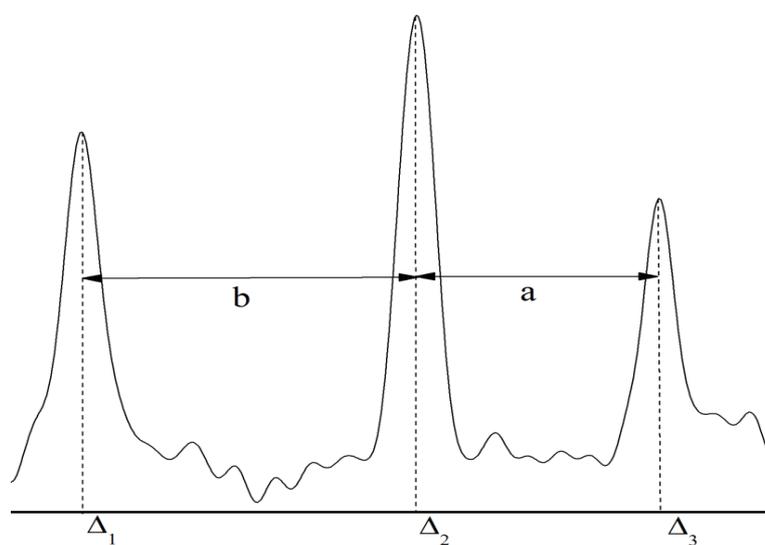


Рисунок 8 - Метод комбинационных разностей

Зная положение нижнего уровня, длины волн переходов, можно рассчитать энергию верхнего уровня. При наличии нескольких комбинаций совпадений выбирается тот, который советуется заданной точности поиска «с».

Это значит, что при отклонении центра линии спектра от деления «линейки» на величину меньшую или равную « $c$ », результат принимают как верный (обычно  $c \approx 0,0015 \text{ см}^{-1}$ ), иначе ищется другой вариант.

## 2.4 Модель эффективного Гамильтониана

Эффективный гамильтониан имеет следующий вид:

$$H^{vib-rot} = \sum_{v, \tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| H^{v\tilde{v}} \quad (26)$$

где суммирование проводится по всем взаимодействующим колебательным состояниям:  $|1\rangle \equiv (100, A_1)$ ,  $|2\rangle \equiv (020, A_1)$  and  $|3\rangle \equiv (001, B_1)$ . Диагональные операторы  $H_{vv}$  описывают невозмущенную вращательную структуру соответствующих колебательных состояний. Недиагональные операторы  $H_{v\tilde{v}} (v \neq \tilde{v})$  описывают резонансные взаимодействия между состояниями  $|v\rangle$  и  $|\tilde{v}\rangle$ .

$$H^{v\tilde{v}} = \begin{vmatrix} & 1 & 2 & 3 \\ 1 & W & F & C \\ 2 & - & W & - \\ 3 & - & - & W \end{vmatrix} \quad (27)$$

Оператор Уотсона [18], идеально описывает вращательную структуру изолированного колебательного состояния, поэтому диагональные блоки имеют следующий вид:

$$H_{vv} = E^v + \left[ A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(e^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 +$$

$$\begin{aligned}
& H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J_z^2 + h_J^v J^4] + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^4 J_z^2 + L_{JK}^v J_z^2 J^4 + L_{KJJ}^v J_z^2 J^6 + \\
& L_J^v J^8 + [J_{xy}^2, l_K^2 J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^2 J_z^4 + l_{JK}^v J^4 J_z^2 + l_J^v J^6] + \dots, + P_K^v J_z^{10} + P_{KKKJ}^v J_z^8 J_z^2 + \\
& P_{KKJ}^v J_z^6 J^4 + P_{JJK}^v J_z^4 J^6 + S_K^v J_z^{12} + S_{KKKKJ}^v J_z^{10} J^2 + \dots
\end{aligned} \tag{28}$$

Здесь  $J_\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) это компоненты оператора полного углового момента, определенные в системе координат связанной с молекулой;  $J_{xy}^2 = J_x^2$ ;  $A^v$ ,  $B^v$  и  $C^v$  - эффективные вращательные постоянные, связанные с колебательным состоянием  $\nu$ , и другие параметры - коэффициенты центробежного искажения различных порядков.

Следует отметить, что оператор Уотсона выполнен в  $A$ -редукции и  $\Gamma^r$ -представлении.

### 3. Результаты проведенного исследования

#### 3.1 Детали эксперимента

Экспериментальный спектр в районе полосы поглощения  $\nu_2$  (от 400 до 700  $\text{см}^{-1}$ ) был зарегистрирован на Фурье–спектрометре Bruker IFS120 HR в университете г. Брауншвейг (Германия).

Эксперимент проводился при давлении 10 Па, длине оптического пути 4 м и комнатной температуре. Инструментальное разрешение составило 0,0025  $\text{см}^{-1}$ . Было проведено 695 сканирований в течение 32 ч. Калибровка спектров производилась на основе линий газа  $\text{N}_2\text{O}$ .

На рисунке 9 представлен зарегистрированный спектр высокого разрешения молекулы  $^{32}\text{SO}_2$  в исследуемом диапазоне.

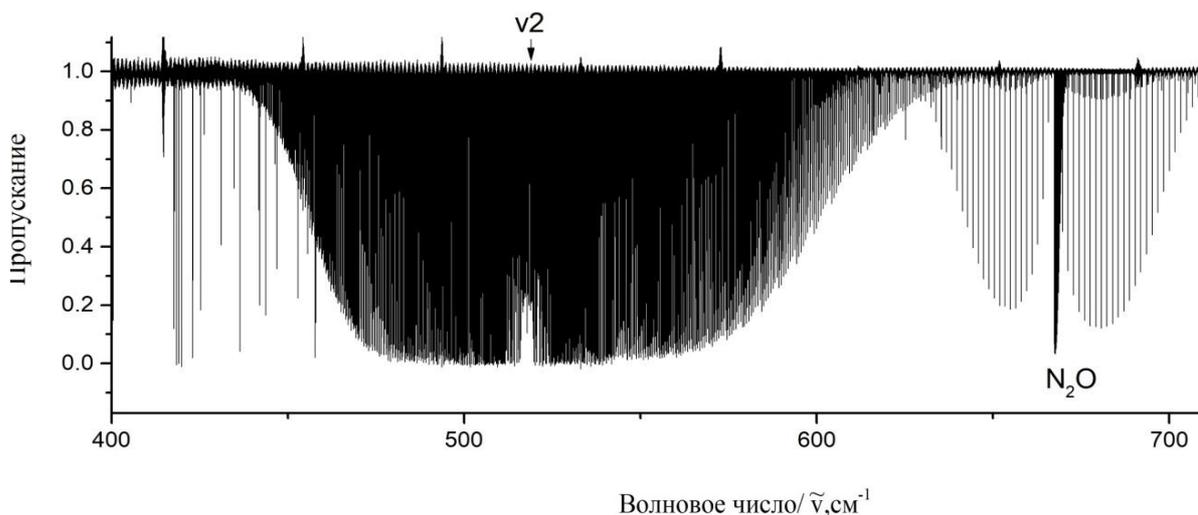


Рисунок 9 - Спектр молекулы  $^{32}\text{SO}_2$  в диапазоне 400-700  $\text{см}^{-1}$

### 3.2 Интерпретация экспериментальных спектров

В исследуемом спектральном диапазоне локализована полоса  $\nu_2$ . Центр полосы  $\nu_2$  приходится на  $517.87 \text{ см}^{-1}$ . Исходя из симметрии молекулы, исследуемая полоса является полосой  $b$ -типа и, следовательно, обладает следующими правилами отбора:  $\Delta J = 0, \pm 1$ ;  $\Delta K_a = \pm 1$ .

Колебательно-вращательный анализ спектра был выполнен с помощью метода комбинационных разностей. Для осуществления данного метода требуется знать с высокой точностью положение энергетических уровней основного колебательного состояния. Набор спектроскопических параметров, описывающих вращательную структуру основного колебательного состояния был взят из работы [19] и представлен в таблице 2.

Таблица 2 - Спектроскопические параметры основного состояния

Параметры	Значение
$A$	2.02735420407(163)
$B$	0.344173882136(410)
$C$	0.293526503766(428)
$\Delta_K \times 10^4$	0.864015421(289)
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	-0.390123832(126)
$\Delta_J \times 10^4$	0.220539487(159)
$\delta_K \times 10^4$	0.846291509(854)
$\delta_J \times 10^4$	0.567423257(229)

(Продолжение таблицы 2)

$H_K \times 10^8$	0.12360428(155)
$H_{KJ} \times 10^8$	-0.64960685(842)
$H_{JK} \times 10^8$	0.1160311(386)
$H_J \times 10^8$	0.3746170(246)
$h_K \times 10^8$	0.5679872(101)

В результате интерпретации спектра было получено около 2500 колебательно-вращательных переходов. Для иллюстрации процесса интерпретации на рисунке 10 приведена часть проанализированного спектра в районе  $Q$  - ветви. Наблюдается типичная для  $b$  - типа полосы структура  $Q$  - ветви, что говорит о качестве проведенного исследования.

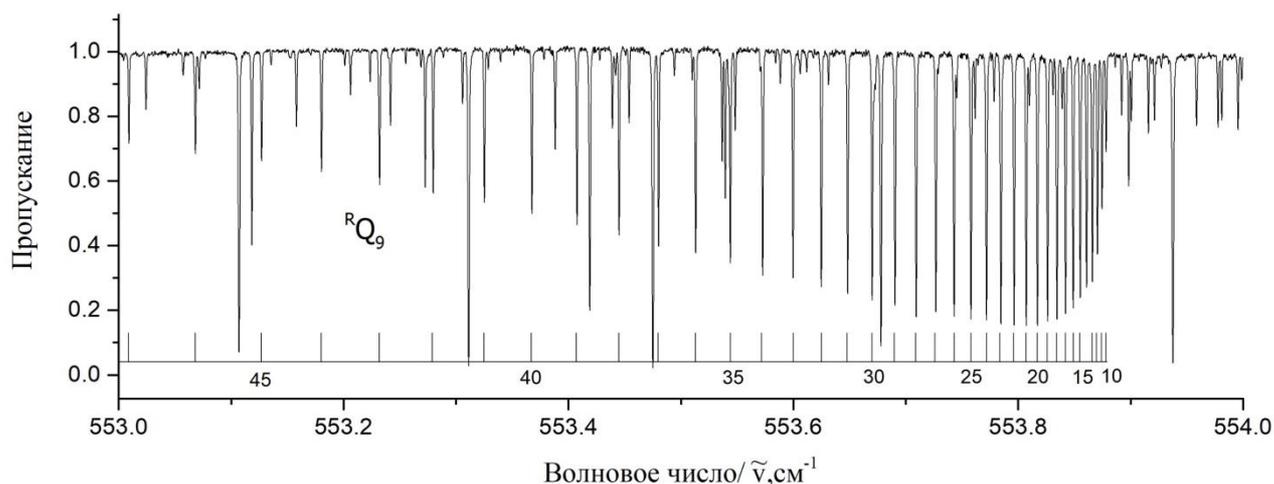


Рисунок 10 – Фрагмент  $Q$ -ветви полосы  $\nu_2$

Полученное количество энергетических переходов соответствует около 500 значений энергий верхнего возбужденного состояния. Максимальные

значения квантовых чисел составили  $J = 60$  и  $K_a = 15$ . Вся статистическая информация о полученных результатах представлена в таблице 3. В таблице 4 приведена часть проинтерпретированных переходов и соответствующие им энергии верхнего колебательного состояния ( $v_2 = 1$ ).

Таблица 3 - Результаты анализа спектра

$J_{\max}$	60
$K_{a \max}$	15
Количество энергии	500
Количество переходов	2500

Таблица 4 – Часть определенных энергий верхнего возбужденного состояния

$J$	$K_a$	$K_c$	E
3	1	3	525.86953
3	3	1	512.05471
4	1	3	522.91594
5	3	3	506.30904
5	1	5	527.42857
5	3	3	513.37162
6	1	5	522.70092
6	3	3	509.53896
7	3	5	505.06789
7	1	7	529.17785
7	3	5	514.75532
8	1	7	522.48425

(Продолжение таблицы 4)

8	3	5	509.63484
9	3	7	503.88744
9	1	9	531.16745
9	3	7	516.23815
10	1	9	522.32667
10	3	7	509.81541
11	3	9	502.80375
11	1	11	533.44250
11	3	9	517.84648
12	1	11	522.28781

### 3.3 Решение обратной спектроскопической задачи

Полученные значения энергетических уровней полосы  $\nu_2$  были использованы в процедуре варьирования параметров эффективного гамильтониана, форма которого была описана в разделе 2.4. В результате фиттинга было определено 14 параметров, представленных в таблице 5. Данный набор параметров описывает исходные данные с точностью, соответствующей экспериментальной -  $1,5 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ . В таблице 5 значения в скобках содержат в себе информацию о  $1\sigma$  статистическом доверительном интервале.

Таблица 5 – Спектроскопические параметры эффективного гамильтониана исследуемого состояния

Параметры	$v_2$
$E$	517.8725691(77)
$A$	2.066590241(17)
$B$	0.3442513918(30)
$C$	0.2929979104(32)
$\Delta_K \times 10^4$	0.9581353(39)
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	-0.4071333(22)
$\Delta_J \times 10^4$	0.2210341(23)
$\delta_K \times 10^4$	1.035361(37)
$\delta_J \times 10^4$	0.5707378(38)
$H_K \times 10^8$	0.153773(50)
$H_{KJ} \times 10^8$	-0.75632(14)
$H_{JK} \times 10^8$	4.361(17)
$H_J \times 10^8$	0.37901(63)
$h_K \times 10^8$	0.75177(67)

Сравнивая значения параметров основного состояния с соответствующими значениями параметров состояния ( $v_2 = 1$ ), можно увидеть, что значения не отличаются друг от друга более чем на несколько %, что

соответствует общей колебательно-вращательной теории [20] и говорит о физической обоснованности полученных результатов.

## **4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение**

### **4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения**

#### **4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования**

Основным продуктом этого исследования являются спектральные параметры, которые будут использоваться для дополнения российских и международных баз данных. В свою очередь, последний широко используется для решения астрофизики, физики планет, атмосферной оптики и многих других проблем.

#### **4.1.2 Анализ конкурентных технических решений**

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum V_i B_i. \quad (29)$$

где  $K$  – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;  $V_i$  – вес показателя (в долях единицы);  $B_i$  – балл  $i$ -го показателя.

Данные в Таблице 6 показывают хорошую степень конкурентоспособности, особенно в следующих критериях: безопасность, уровень шума и возможность подключения к компьютерной сети.

Таблица 6 – Оценочная карта для сравнения конкурентных разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспосо бность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1.Время производства	0,05	4	3	3	0,20	0,15	0,15
2.Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,20
3. Надёжность	0,05	5	3	3	0,25	0,15	0,15
4. Безопасность	0,15	5	4	4	0,75	0,60	0,60
5.Простота эксплуатации	0,05	4	4	5	0,20	0,20	0,25
6. Уровень шума	0,15	5	3	4	0,75	0,45	0,60
7. Возможность подключения в сеть ЭВМ	0,20	5	2	3	1,00	0,40	0,60
Экономические критерии оценки эффективности							

1. Конкурентоспособность продукта	0,05	4	5	4	0,20	0,25	0,05
2. Уровень проникновения на рынок	0,05	3	4	4	0,15	0,20	0,20
3. Послепродажное обслуживание	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,20
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,05	5	3	4	0,25	0,15	0,20
5. Срок выхода на рынок	0,05	4	5	3	0,25	0,25	0,25
6. Финансирование научной разработки	0,05	5	5	5	0,25	0,25	0,25
Итого	1	57	49	47	4,60	3,45	3,75

Данные в Таблице 6 показывают хорошую степень конкурентоспособности, особенно в следующих критериях: безопасность, уровень шума и возможность подключения к компьютерной сети.

#### 4.1.3 Технология QuaD

Технология QuaD (Quality ADvisor) представляет собой гибкий инструмент измерения характеристик, описывающих качество новой

разработки и её перспективность на рынке и позволяющие принимать решение целесообразности вложения денежных средств в научно-исследовательский проект[21].

Оценка качества и перспективности по технологии QuaD определяется по формуле:

$$P_{cp} = \sum B_i B_i , \quad ( 30 )$$

где  $P_{cp}$  – средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки;  $B_i$  – вес показателя (в долях единицы);  $B_i$  – средневзвешенное значение  $i$ -го показателя.

Таблица 7 – Оценочная карта для сравнения конкурентных разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы	Максимальный балл	Относительное значение	Средневзвешенное значение
Показатели оценки качества разработки					
1.Время производства	0,05	85	100	0,85	0,0425
2.Энергоэффективность	0,1	93	100	0,93	0,093
3. Надёжность	0,05	86	100	0,93	0,043
4. Безопасность	0,15	88	100	0,88	0,132
5.Простота эксплуатации	0,05	96	100	0,96	0,048
6.Ремонтопригодность	0,15	94	100	0,94	0,141
7. Уровень шума	0,05	100	100	1	0,05
Показатели оценки коммерческого потенциала разработки					

8.Конкурентоспособность продукта	0,05	82	100	0,82	0,041
9.Уровень проникновения на рынок	0,05	69	100	0,69	0,0345
10.Унифицированность	0,05	79	100	0,82	0,041
11.Финансовая эффективность научной разработки	0,15	95	100	0,69	0,0395
12. Срок выхода на рынок	0,05	84	100	0,84	0,042
13.Перспективность рынка	0,05	96	100	0,96	0,48
Итого	1	88,23	100	0,882	0,069

Полученное значение  $\Pi_{cp}$  говорит о том, что перспективность данного производства выше среднего.

#### 4.1.4 SWOT-анализ

**SWOT** – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – Это комплексный анализ исследовательского проекта. SWOT-анализ используется для изучения внешней и внутренней среды проекта.

Сильные стороны. Сильные стороны – это факторы, характеризующие конкурентоспособную сторону научно-исследовательского проекта. Сильные

стороны свидетельствуют о том, что у проекта есть отличительное преимущество или особые ресурсы, являющиеся особенными с точки зрения конкуренции. Другими словами, сильные стороны – это ресурсы или возможности, которыми располагает руководство проекта и которые могут быть эффективно использованы для достижения поставленных целей.

Слабость – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей. Это то, что плохо получается в рамках проекта или где он располагает недостаточными возможностями или ресурсами по сравнению с конкурентами.

Возможности включают в себя любую предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта, например, тенденцию, изменение или предполагаемую потребность, которая поддерживает спрос на результаты проекта и позволяет руководству проекта улучшить свою конкурентную позицию.

Угроза представляет собой любую нежелательную ситуацию, тенденцию или изменение в условиях окружающей среды проекта, которые имеют разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем. В качестве угрозы может выступать барьер, ограничение или что-либо еще, что может повлечь за собой проблемы, разрушения, вред или ущерб, наносимый проекту[21].

Таблица 8 – SWOT анализ

	<b>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</b>	<b>Слабые стороны научно-исследовательского</b>
--	---	---

	<p>С1. Наличие бюджетного финансирования</p> <p>С2. Актуальность тематики</p> <p>С3. Использование современных программ</p> <p>С4. Использование собственной разработки программного обеспечения</p> <p>С5. Оригинальность решения поставленной задачи</p> <p>С6. Наличие всех материалов для исследования</p>	<p><b>проекта:</b></p> <p>Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки</p> <p>Сл2. Отсутствие потенциальных потребителей Сл3. Программное обеспечение с закрытым исходным кодом</p> <p>Сл4. Большая трудоёмкость работы Сл5. Долгое ожидание результатов эксперимента</p>
<p><b>Возможности:</b></p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на результаты исследования</p> <p>В3. Возможность появления новых методов анализа</p> <p>В4. Расширение лаборатории</p> <p>В5. Возможность улучшения программного обеспечения</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что нужно расширять лабораторию и попытаться улучшить программные обеспечения, чтобы увеличить эффективность программного обеспечения.</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования, чтобы уменьшить трудоёмкость работы.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на результаты</p>	<p>По результатам интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы» можно сделать вывод</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые</p>

исследования У2. Развитая конкуренция других научных центров У3. Задержки финансирования У4. Ограничение точности эксперимента У5. Повышение издержек	о том, что возможные угрозы при производстве, такие как отсутствие спроса и развитая конкуренция, могут сильно ослабить позиции данного научного исследования. тематика очень актуальна, и мы имеем оригинальные решения поставленной задачи молекулярной спектроскопии высокого разрешения, поэтому мы имеем конкурентоспособность	стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования. При необходимости можно стремиться к сотрудничеству с другими научными центрами.
---	--	--

## **4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований**

Альтернатив подобным исследованиям нет, за исключением таких же исследований, выполненных в иных научных центрах

## **4.3 Планирование научно-исследовательских работ**

### **4.3.1 Структура работ в рамках научного исследования**

Для проведения научных исследований создается рабочая группа, которая может включать исследователей и преподавателей, инженеров, техников и лаборантов, количество групп может варьироваться.

Таблица 9 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель, бакалавр
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	Руководитель, бакалавр
	3	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель, бакалавр
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, бакалавр
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Выбор методики для исследования	Руководитель
	6	Ознакомление с методикой исследованием и программным обеспечением	Бакалавр
	7	Интерпретация спектра	Бакалавр
	8	Решение обратной задачи и получение результатов (спектроскопические параметры)	Руководитель, бакалавр
Обобщение и оценка результатов	9	Проверка полученных результатов	Руководитель, бакалавр
	10	Оформление вывода	Руководитель, бакалавр
Оформление комплекта документации	11	Составление пояснительной записки	Бакалавр
	12	Подготовка темы к	Бакалавр

по ВКР		защите	
--------	--	--------	--

### 4.3.2. Определение трудоёмкости выполнения работ

Чтобы определить ожидаемое (среднее) значение трудоёмкости, используется следующая формула:

$$t_{ожi} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (31)$$

где  $t_{ожi}$  – наиболее вероятное время в течение, которого должна быть выполнена работа, чел-дни;  $t_{\min i}$  – минимальное время для выполнения данного этапа при благоприятном стечении обстоятельств, чел-дни;  $t_{\max i}$  – максимальное время для выполнения данного этапа при неблагоприятном стечении обстоятельств, чел-дни.

Исходя из ожидаемой трудоёмкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях  $T_p$ , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{Pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (32)$$

где  $T_{Pi}$  – продолжительность одной работы, раб. дней;  $t_{ожi}$  – ожидаемая трудоёмкость выполнения одной работы, чел-дни;  $Ч_i$  – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

### 4.3.3 Разработка графика проведения научного исследования

При поступлении в дипломные работы студенты в основном становятся участниками относительно небольших научных тем. Поэтому наиболее удобным и очевидным является построение ленточного графика для проведения научной работы в виде диаграммы Ганта.

Чтобы перевести продолжительность каждого этапа с рабочих на календарные дни, вам нужно использовать формулу:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (33)$$

где  $T_{ki}$  – продолжительность выполнения  $i$ -й работы в календарных днях;  $T_{pi}$  – продолжительность выполнения  $i$ -й работы в рабочих днях;  $k_{\text{кал}}$  – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (34)$$

где  $T_{\text{кал}}$  – количество календарных дней в году;  $T_{\text{вых}}$  – количество выходных дней в году;  $T_{\text{пр}}$  – количество праздничных дней в году.

В 2014 году 365 календарных дней, из которых 104 выходных и 14 праздничных дней. Тогда коэффициент календаря:

$$k_{\text{кал}} = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1,48.$$

Таблица 10 – Временные показатели проведения научного исследования

	Название работ	Трудоёмкость работ	Испол	Тр, раб.	Тр, кал.
--	----------------	--------------------	-------	----------	----------

N o		t <sub>min</sub> , чел-дн		t <sub>max</sub> , чел-дн.		t <sub>ож</sub> , чел-дн.		н ители		дн.		дн.	
		Р	Б	Р	Б	Р	Б	Р	Б	Р	Б	Р	Б
1	Составление и утверждение технического задания	4	4	8	8	5,6	5,6	+	+	2,8	2,8	4	4
2	Выбор направления исследований	2	2	5	5	3,2	3,2	+	+	1,6	1,6	2	2
3	Подбор и изучение материалов по теме	12	12	20	20	15,2	15,2	+	+	7,6	7,6	10	10
4	Календарное планирование работ по теме	2	2	4	4	2,8	2,8	+	+	1,4	1,4	2	2
5	Выбор методики для исследования	3	-	5	-	3,8	-	+	-	3,8	-	4	-
6	Ознакомление с методикой исследованием и программным обеспечением	-	5	-	8	-	6,2	-	+	-	6,2	-	8
7	Интерпретация спектра	-	30	-	35	-	32	-	+	-	32	-	40
8	Решение обратной задач и получение результатов	20	20	25	25	22	22	+	+	11	11	15	15
9	Проверка	5	5	8	8	6,2	6,2	+	+	3,1	3,1	5	5

	полученных результатов												
10	Оформление вывода	2	2	3	3	2,4	2,4	+	+	1,2	1,2	2	2
11	Составление пояснительной записки	-	13	-	16	-	14,2	-	+	-	14,2	-	18
12	Подготовка темы к защите	-	5	-	8	-	6,2	-	+	-	6,2	-	10

Р – руководитель; Б – бакалавр

На основе таблицы 10 расписание календаря построено в виде диаграммы Ганта (таблица 11)

Таблица 11 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

No работ	Вид работ	Исполнители	$T_{Ki}$ кал. дн.	Продолжительность выполнения работ													
				февр.		март			апрель			май			июнь		
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1		
1	Составление и утверждение технического задания	Р, Б	4	■													
2	Выбор направления исследований	Р, Б	2	■													
3	Подбор и изучение материалов по теме	Р Б	10	■	■												



#### 4.3.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по различным статьям.

##### 4.3.4.1 Расчёт материальных затрат НТИ

Расчёт материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \sum_{i=1}^m C_i N_{\text{расх } i}, \quad (35)$$

где  $m$  – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;  $N_{\text{расх } i}$  – количество материальных ресурсов  $i$ -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м<sup>2</sup> и т.д.);  $C_i$  – цена приобретения единицы  $i$ -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м<sup>2</sup> и т.д.);  $k_T$  – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

В данном научно-техническом исследовании нет материальных затрат, так как мы делаем теоретический анализ.

##### 4.3.4.2 Расчёт затрат на специальное оборудование для экспериментальных работ

В данной статье включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, приборов, стендов, устройств и

механизмов), необходимых для выполнения работы по определенной теме. Все расчеты по приобретению специального оборудования и оборудования в организации приведены в таблице 14.

Таблица 12 – Расчёт бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
Персональный компьютер	1	40	40
Итого			40

#### 4.3.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает в себя основные оклады и дополнительные оклады. Также включен бонус, выплачиваемый ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20-30% от тарифа или заработной платы:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (36)$$

где  $Z_{осн}$  – основная заработная плата;  $Z_{доп}$  – дополнительная заработная плата (12 – 20 % от  $Z_{осн}$ ).

Основная заработная плата (  $Z_{осн}$  ) руководителя от предприятия рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (37)$$

где  $Z_{осн}$  – основная заработная плата одного работника;  $Z_{дн}$  – среднедневная заработная плата работника, руб.;  $T_p$  – продолжительность работ, выполняемых научно – техническим работником, раб. дн. (таблица 12).

В таблице 13 показан баланс рабочего времени каждого работника.

Таблица 13 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Бакалавр
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
выходные дни:	52	104
праздничные дни:	14	14
Потери рабочего времени		
отпуск:	48	24
невыходы по болезни:	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	223

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{тс} \cdot (1 + k_{пр} + k_d) \cdot k_p, \quad (38)$$

где  $Z_{тс}$  – заработная плата по тарифной ставке, руб.;  $k_{пр}$  – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от  $Z_{тс}$ );  $k_d$  – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5;  $k_p$  – районный коэффициент, для Томска равный 1,3.

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 14.

Таблица 14 – расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{тс}$ , руб.	$k_d$	$k_p$	$Z_m$ , руб	$Z_{дн}$ , руб.	$T_p$ , раб. дн.	$Z_{осн}$ , руб.

Руководитель	22638,7	0,35	1,3	48560	2012	44	88530,1
Бакалавр	14874,5	0,35	1,3	25524,6	945,4	116	109666,4

Общая заработная исполнителей работы представлена в таблице 15.

Таблица 15 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	$Z_{\text{осн}}$ , руб.	$Z_{\text{доп}}$ , руб.	$Z_{\text{зп}}$ , руб.
Руководитель	88530,1	11508,9	100039
Бакалавр	109666,4	14256,6	123923

#### 4.3.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Данная статья расходов отражает обязательные взносы в установленных законодательством Российской Федерации к нормам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на рабочую силу.

Величина этих отчислений определяется по формуле:

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (39)$$

где  $k_{\text{внеб}}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 18.

Таблица 18 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	88530,1	11508,9

Бакалавр	109666,4	14256,6
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,305	
<b>Итого:</b>	<b>68308,4</b>	

#### 4.3.4.5 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по следующей формуле:

$$Z_{\text{накл}} = k_{\text{нр}} \cdot (\text{ссумм статей} 1 \div 7), \quad (40)$$

где  $k_{\text{нр}}$  – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов  $k_{\text{нр}}$  допускается взять в размере 16%. Таким образом, накладные расходы на данные НИИ составляют 17748 руб.

#### 4.3.4.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект приведён в таблице 17.

Таблица 17 – Расчёт бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		Примечание
	Исп.1	Исп.2	
1. Материальные затраты НИИ	0	0	-
2. Затраты на специальное оборудование для научных	40000	40000	Таблица 14

(экспериментальных) работ			
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	88530,1	109666,4	Таблица 17
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	11508,9	14256,6	Таблица 17
5. Отчисления во внебюджетные фонды	30511,9	37796,5	Таблица 18
6. Накладные расходы	27288,1	32275,1	16 % от суммы ст. 1-5
7. Бюджет затрат НТИ	197839	233994,6	Сумма ст. 1-6

Можно видеть из таблицы 19 основные затраты НТИ приходятся на основную заработную плату исполнителей темы.

#### **4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования**

Определение эффективности основано на расчете интегрального показателя эффективности научных исследований.

*Интегральный финансовый показатель* разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (41)$$

где  $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$  – интегральный финансовый показатель разработки;  $\Phi_{pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;  $\Phi_{\text{max}}$  – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Таблица 18 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда	0,25	5	5	3
2. Удобство в эксплуатации	0,15	4	4	3
3. Надёжность	0,20	5	5	4
4. Воспроизводимость	0,25	4	4	4
5. Материалоёмкость	0,15	5	3	4
ИТОГО	1	4,6	4,3	3,6

Таблица 19 – Сравнительная эффективность разработки

No п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,997	1	0,986
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,6	4,3	3,6
3	Интегральный показатель эффективности	4,61	4,3	3,65
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,93	0,97

Вывод: Сравнительный анализ интегрированных показателей эффективности показывает, что первый вариант - более эффективный вариант решения технической проблемы, поставленной в работе бакалавриата с точки зрения финансовой и ресурсной эффективности, благодаря обеспечению высоких показателей реализации.

## **5. Социальная ответственность при исследовании тонкой колебательно-вращательной структуры спектра поглощения молекулы SO<sub>2</sub>**

Социальная ответственность или корпоративная социальная ответственность (как моральный и этический принцип) несет ответственность перед людьми и обещаниями, сделанными ими, когда организация учитывает интересы коллектива и общества, беря на себя ответственность за влияние своей деятельности на клиентов, поставщиков, сотрудники, акционеры (ISO 26000: 2011 [22]).

Данная итоговая квалификационная работа представлена исследовательской работой, в ходе которой обработка результатов анализа, составление карт и набрав на персональном компьютере, поэтому в разделе «Производственная безопасность при проведении геоэкологических исследований» рассматривается «Производственная безопасность при работе на персональных компьютерах».

Целью настоящего раздела является анализ опасных и вредных факторов в этом виде производственной деятельности и решение вопросов обеспечения их защиты на основе требований действующих нормативных и технических документов.

Работа бакалавра относится к категории умственного труда и, в зависимости от степени физической силы, относится к категории легкой работы

(работа выполняется сидя и не требует физического напряжения, при котором потребление энергии достигает 120 ккал / ч).

Работа проводилась на отделение экспериментальной физики школы базовой инженерной подготовки Национального исследовательского Томского политехнического университета. Для выполнения окончательной квалификационной работы по теме «Исследование тонкой колебательно-вращательной структуры спектра поглощения молекулы  $\text{SO}_2$ : полос  $\nu_2$ » было проведено компьютерное исследование.

### **5.1 Производственная безопасность в компьютерном помещении**

Работы на электронных компьютерах и терминалах видеодисплея проводятся в помещении, отвечающем требованиям Санитарных правил и норм (СанПиН 2.2.2 / 2.4.1340-03 [23]).

Рабочее место находится в аудитории на втором этаже здания, имеет естественное и искусственное освещение. Площадь на рабочем месте с ПК составляет не менее 6 м<sup>2</sup>, а объем - не менее 20 м<sup>3</sup>. В рабочем классе есть два персональных компьютера. В номере есть системы отопления, эффективная система подачи и вытяжки. Система отопления обеспечивает постоянный и равномерный нагрев воздуха в помещении в холодный период года. Система вентиляции обеспечивает постоянную подачу свежего воздуха. Минимальный расход воздуха составляет 50-60 м<sup>3</sup> / час на одного работника, воздушный обмен в течение 1 часа - два-три раза (СНиП 2.04.05-91). Для выявления

опасностей при работе на компьютере проводится анализ классификации опасностей в соответствии с ГОСТ 12.0.003-74 [24] (таблица 20).

Таблица 20 – Основные элементы производственного процесса камеральных работ, формирующие опасные и вредные факторы

Наименование видов работ и параметров производственного процесса	Факторы (ГОСТ 12.0.003-74 ССБТ) [22]		Нормативные документы
	Вредные	Опасные	
1	2	3	4
1. Постоянная сидячая работа в помещении за компьютером. Обработка информации на персональном компьютере (обработка базы данных; написание анализа)	1.Отклонение показателей микроклимата в помещ-ении; 2.Недостаточн-а я освещённ-ость рабочей зоны; 3.Монотонный режим работы; 4.Превышение уровней шума; 5.Превышение уровней электромагнитн ых излучений.	1.Электр обезопас ность	1. ГОСТ 12.1.005-88 [25] 2. СанПиН 2.2.4.548-96 [26] 3. СНиП 23-05-95 [27] 4. ГОСТ 12.1.019-79 [28] 5. ГОСТ 12.1.038-82 [29] 6. ГОСТ 12.1.004-91 [30] 7. ГОСТ 12.1.003-83 [31]

Примечание: пожароопасность в п. 5.4, как ЧС.

### 5.1.1 Анализ вредных производственных факторов и обоснование мероприятий по их устранению

Отклонение индексов микроклимата в помещении.

Микроклиматические параметры - это сочетание температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха. Эти параметры в значительной степени влияют на функциональную активность человека, его здоровье, его здоровье, а также надежность работы компьютерных технологий. Для создания нормальных условий для персонала установлены нормы промышленного микроклимата. В промышленных помещениях, где работа на ПЭВМ является основной, согласно СанПиН 2.2.4.548-96 [26], должны быть предоставлены оптимальные параметры микроклимата.

Занесём показатели температуры, влажности и скорости воздуха в таблицу 23.

В сезоне года будет два периода:

- Холодный. Среднесуточная температура наружного воздуха равна +10°C.

- Тёплый. Среднесуточная температура наружного воздуха выше +10°C.

Так как в помещении работают инженеры-программисты, то категория тяжести выполняемых работ – Ia.

Таблица 21 – Оптимальные нормы микроклимата для помещений с ВДТ и ПЭВМ (СанПиН 2.2.4.548-96 [26])

Сезон года	Категория тяжести выполняемых работ	Температура, °С		Относительная влажность, %		Скорость движения воздуха, м/сек	
		Фактич. значение	Допустим. значение	Фактич. значение	Допустим. значение	Фактич. значение	Допустим. значение
1	2	3	4	5	6	7	8
Холодный	Ia	22	22-24	45	40-60	0.1	0.1
Тёплый	Ia	25	23-25				

Анализ характеристик микроклимата будем производить согласно ГОСТ 12.1.005-88 [25].

Согласно измерениям, все показатели соответствуют нормам. Для поддержания требуемой температуры, влажности и скорости воздуха в помещении используются отопление и кондиционирование воздуха.

Недостаточное освещение рабочей зоны. В помещении, где расположено рабочее место, есть естественное и искусственное освещение. Естественный свет обеспечивается через свет апертуры, ориентированный на восток и запад. Естественный свет нормализуется естественным светом (КЕО) или (е) естественным светом. Коэффициент естественной освещённости равен:

$$КЕО = \frac{E}{E_0} \cdot 100\%, \quad (42)$$

где  $E$  – освещённость (измеренная) на рабочем месте, лк;  $E_0$  – освещённость на улице (при среднем состоянии облачности), лк. Обеспечивается коэффициент естественного освещения (КЕО) не ниже 1,5%.

Искусственное освещение разделено на общее и местное. При общем освещении светильники устанавливаются в верхней части помещения параллельно стене с оконными отверстиями, что позволяет их включать и выключать последовательно, в зависимости от изменения естественного освещения. Для выполнения таких работ, как, например, обработка документов, требуется дополнительное местное освещение, которое концентрирует световой поток непосредственно на инструментах и предметах труда. Освещение на поверхности стола в зоне размещения рабочего документа должно составлять 300-500 люкс. В области рабочего места освещение должно быть 300-500 люкс, яркость светящихся поверхностей (окон, ламп и т. Д.) В поле зрения, <200 кд / м<sup>2</sup>, коэффициент пульсаций <5% СНиП 23-05 -95 [27].

Одним из методов расчета искусственного освещения является метод светового потока, который используется для определения общего равномерного освещения на горизонтальной поверхности. Световой поток от лампы накаливания или группы разрядных ламп, образующих светильник, рассчитывается по формуле:

$$\Phi_{л} = \frac{100 \cdot E_n \cdot S \cdot K \cdot Z}{N \cdot \eta}, \quad (43)$$

где  $\Phi_{л}$  – световой поток лампы или группы ламп, лм;  $N$  – число светильников в помещении, шт.;  $E_n$  – нормированная минимальная освещённость, лк.  $S$  –

площадь освещаемого помещения,  $m^2$ ;  $Z$  – коэффициент минимальной освещённости, равный отношению  $E_{cp}/E_{min}$ , значение которого для ламп накаливания составляет 1,15, а для люминесцентных ламп – 1,1;  $K$  – коэффициент запаса, составляющий для ламп накаливания 1,3-1,6 и для разрядных ламп – 1,4-1,8;  $\eta$  – коэффициент использования светового потока ламп. Световой поток группы ламп 2150 лк.

Недостаточное освещение приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к возникновению преждевременной усталости. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и боль в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать острые тени, блики, дезориентировать рабочего. Все эти причины могут привести к несчастному случаю или профессиональным заболеваниям, поэтому правильный расчет освещения так важен.

Расчет освещенности комнаты. Одним из методов расчета искусственного освещения является метод светового потока. Он используется для определения общего равномерного освещения на горизонтальной поверхности.

Мы вычисляем искусственное освещение в исследовании и сравниваем его с нормами освещения на рабочем месте в соответствии со СНиП 23-05-95 «Стандарты освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении» [27].

Данное помещение имеет следующие размеры: длина  $A = 4,1$  м, ширина  $B = 3$  м, высота  $H = 2,5$  м. Высота рабочей поверхности  $h_{pp} = 0,9$  м. Шкаф

использует систему общего равномерного освещения. Светильники расположены в два ряда. В каждом ряду есть 2 лампы типа ШОД мощностью 40 Вт (с длиной 1,23 м), при этом разрывы между светильниками в ряду составляют 50 см. Изобразим схему помещения и размещения на нём светильников (Рисунок 11). Учитывая, что в каждом светильнике установлено две лампы, общее число ламп в помещении  $N = 8$ . В светильниках установлены люминесцентные лампы белой цветности (ЛБ) мощностью 40 Вт, работающие от сети напряжением 220 В, и обеспечивающие световой поток  $\Phi = 2800$  лм.

Коэффициент отражения стен (оклеены светлыми обоями)  $R_c = 50 \%$ , потолка (свеж побеленный)  $R_n = 70 \%$ . Коэффициент запаса  $k = 1,5$  для помещений с малым выделением пыли, коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп принимается равным  $Z = 1,1$ .

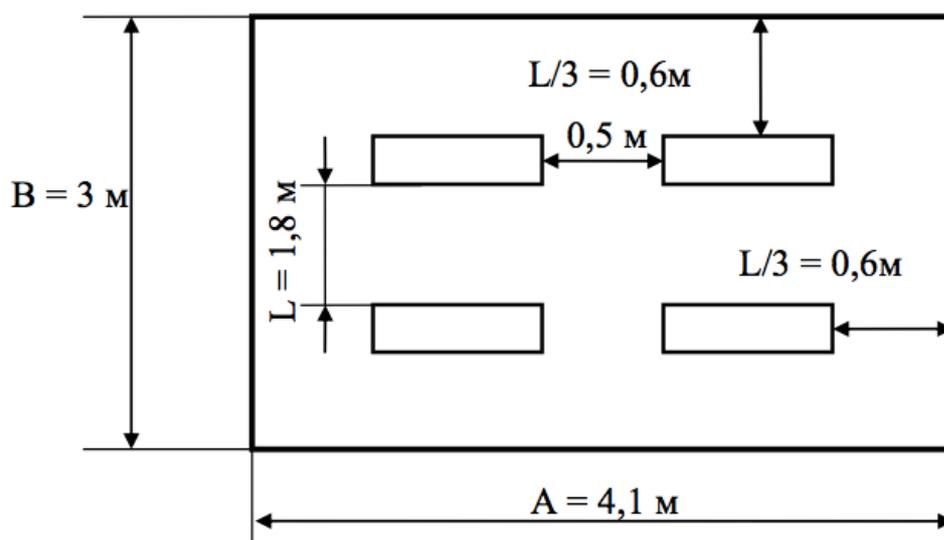


Рисунок 11 – Схема размещения светильников в помещении.

Высота светильника в среднем  $h = 0,3$  м.

$$h = 1,3 \text{ м}; L = 1,8 \text{ м}; L/3 = 0,6 \text{ м}.$$

Освещённость в помещении определяется по формуле:

$$E = \frac{\Phi \cdot N \cdot \eta}{S \cdot K_s \cdot Z}, \quad (44)$$

где  $\Phi$  – световой поток одной лампы, лм;  $S$  – площадь освещаемого помещения, м<sup>2</sup>;  $K_s$  – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника (источник света, осветительная арматура, стены и т. д., т. е. отражающие поверхности), наличие дыма и пыли в атмосфере магазина;  $Z$  – коэффициент неравномерности освещения;  $N$  – число ламп в помещении;  $\eta$  – коэффициент использования светового потока.

Коэффициент использования светового потока показывает, сколько световой поток ламп падает на рабочую поверхность. Это зависит от индекса комнаты  $i$ , типа светильника, высоты светильников над рабочей поверхностью  $h$  и коэффициентов отражения стен  $\rho_c$  и потолка  $\rho_n$ .

Находим индекс помещения:

$$i = \frac{S}{h \cdot (A+B)}, \quad (45)$$

$$i = 12,3 / (1,3(4,1+3)) = 1,33$$

Коэффициент использования светового потока:  $\eta = 0,44$ .

Определяем освещённость в помещении:

$$E = \frac{2800 \cdot 8 \cdot 0,44}{12,3 \cdot 1,5 \cdot 1,1} = 485,6 \text{ (лк)}$$

Согласно СНиП 23-05-95 «Нормы освещения на рабочих местах производственных помещений под искусственным освещением» [27] визуальная работа в этом зале относится к классу наивысшей точности, так как

наименьший размер объекта различения на экране компьютера менее 0,15 мм (точка). Разряд зрительной работы – I, подразряд – г (контраст объекта с фоном – средний, большой; фон – светлый, средний). Для данных параметров устанавливается норма освещённости – 300-400 лк при системе общего освещения.

Из полученных нами результатов можно сделать вывод, что эта служба, с учетом выполненных в ней визуальных работ, соответствует нормам освещенности, установленным СНиП 23-05-95 [27].

Для обеспечения нормализованных значений освещенности при использовании ПК необходимо чистить оконные стекла и лампы не реже двух раз в год и своевременно заменять сожженные лампы. Для защиты от чрезмерной яркости окон можно использовать шторы и шторы.

Монотонный режим работы. Известно, что работоспособность не является постоянной, она меняется. Основной причиной изменения работоспособности является сама работа. Обычно производительность снижается с более или менее продолжительной производительностью. Снижение работоспособности под воздействием выполненной работы обычно считается усталостью. В то же время имеется много данных, указывающих на то, что в дополнение к рабочей нагрузке в реальной рабочей деятельности определенные условия труда также зависят от неблагоприятных условий труда, в том числе от характера выполняемой работы. Таким образом, влияние на эффективность фактора монотонности широко известно.

Прикладные показатели, в первую очередь, можно разделить на «объективные» и «субъективные». Объективными показателями эффективности являются: а) изменения количественных и качественных показателей работы и б) изменения функционального состояния нервной системы. Субъективные показатели включают чувство усталости, летаргии, болезненных ощущений. Эти субъективные переживания свидетельствуют о тех психических состояниях, которые развиваются со снижением эффективности. Психическое состояние во время усталости обычно обозначается термином «усталость». В дополнение к этому состоянию в ходе трудовой деятельности могут возникать другие психические состояния, связанные с особым интересом к результатам работы или, наоборот, безразличие к ним, состояние беспокойства и т. Д. Все эти состояния также имеют отпечаток на соответствующих субъективных показателях.

Неблагоприятное влияние монотонности на производительность, конечно, проявляется во всех показателях эффективности. Имеющиеся данные показывают, что при монотонной работе наблюдается более раннее появление как объективных, так и субъективных признаков снижения эффективности.

Разница в динамике работоспособности немонотонной и монотонной работы привела к тому, что ряд исследователей пришли к выводу, что монотонная работа развивает особое специфическое состояние, называемое монотонностью, отличное от состояния фактической усталости, со своими особыми физиологическими механизмами.

По мнению большинства исследователей, торможение, которое развивается в центральной нервной системе при усталости, является результатом перегрузки соответствующих систем головного мозга и играет защитную, защитную роль, предотвращая их чрезмерное истощение.

Чтобы избежать усталости, необходимо делать 15 минут перерывов каждые 2 часа, а также желательно попробовать более 4 часов, чтобы не заниматься одной и той же работой, необходимо изменить профессию и ситуацию.

Превышение уровня шума. Сильный шум вызывает трудности в распознавании цветовых сигналов, уменьшает скорость восприятия цвета, остроту зрения, визуальную адаптацию, нарушает восприятие визуальной информации, быстро и точно снижает способность выполнять скоординированные движения, снижает производительность на 5-12%. Длительное воздействие шума с уровнем звукового давления 90 дБ снижает производительность труда на 30-60%.

Согласно ГОСТ 12.1.003-83 [31] с изм. 1999 г. эквивалентный уровень звука не должен превышать 50 дБА.

Оборудование, которое производит вибрацию в рабочей комнате, отсутствует, поэтому эта характеристика не будет рассмотрена. Самый высокий уровень шума в рабочем кондиционере - 40 дБА.

В рабочей комнате, согласно измерениям, уровень звука составляет 25-40 дБ, в зависимости от того, работает кондиционер или нет. Соответственно, уровень звука в номере.

Для дальнейшего его уменьшения могут быть предложены следующие меры:

- применить звукопоглощающее покрытие стен;
- экранировка рабочего места;
- установка менее шумного кондиционера.

Превышение уровней электромагнитного излучения. Источники электромагнитное излучение - электрические сигналы цепей при работе компьютера. Нарушения в организме человека под воздействием электромагнитных полей малых напряжений обратимы. При воздействии на поля, которые имеют напряжение выше максимально допустимого уровня, развиваются нарушения со стороны нервной и сердечно-сосудистой систем, органов пищеварения и некоторых биологических показателей крови.

Самым мощным источником электромагнитных полей в комнате являются катушки отклоняющих систем, расположенных вблизи цокольных частей электронно-лучевых трубок мониторов.

Нормы напряженности электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг монитора в соответствии с электрической составляющей, соответствующие [23], приведены в таблице 22.

Таблица 22 – Нормы напряжённости поля

Наименование параметров	Допустимые значения
Напряжённость электромагнитного поля на расстоянии 50 см. Вокруг ВДТ по электрической составляющей должна быть не более:	

- в диапазоне частот от 5 Гц до 2 кГц	25 В/м
- в диапазоне частот 2—400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока должна быть не более:	
- в диапазоне частот от 5 Гц до 2 кГц	250 нТл
- в диапазоне частот 2-400 кГц	25 нТл
Поверхностный электростатический потенциал не должен превышать	500 В

Чтобы соответствовать максимально допустимой напряженности электромагнитного поля, расстояние от глаз до монитора должно составлять 60-70 см, но не менее 50 см. Увеличение расстояния в 2 раза приводит к 32-кратному уменьшению плотности мощности на низких частотах на оператора.

Последние научные достижения в области мониторов позволяют значительно снизить уровень радиации. Использование современных ЭЛТ-мониторов и ЖК-мониторов гарантирует минимальные значения электромагнитных полей вблизи экранов (менее 10 В / м в диапазоне частот от 5 Гц до 2 кГц и менее 1 В / м в частотном диапазоне 2- 400 кГц).

### **5.1.2 Анализ опасных производственных факторов и обоснование мероприятий по их устранению**

Электричество. Электрические установки, к которым практически все компьютерное оборудование представляют большую потенциальную опасность

для человека, поскольку во время работы или проведения профилактических работ человек может коснуться частей, находящихся под стрессом. Конкретная опасность электрических установок - токопроводящих проводников, корпусов компьютерных стеллажей и другого оборудования, которое оказалось напряжения в результате повреждения изоляции, не дают никаких сигналов, предупреждающих человека об опасности. Реакция человека на электрический ток происходит только тогда, когда последний проходит через тело человека.

Электрический ток является скрытым видом опасности, потому что трудно определить в токовых и неточных частях оборудования, которые являются хорошими проводниками электричества. Смертельно опасным для жизни человека считается ток, величина которого превышает 0,05 А, ток менее 0,05 А - безопасен (до 1000 В).

Для предотвращения электротравматической травмы важна правильная организация работы. соблюдение Правил технической эксплуатации бытовых электроустановок и правил безопасности для эксплуатации бытовых электроустановок (потребителей ПДЭ и ПДБ) и Правил электромонтажа (ПЭУ). Для предотвращения электрической травмы необходимо соблюдать требования к электробезопасности людей, работающих на ПЭВМ:

- все узлы одного персонального компьютера и подключённое к нему периферийное оборудование должно питаться от одной фазы электросети;
- корпуса системного блока и внешних устройств должны быть заземлены радиально с одной общей точкой;

- для отключения компьютерного оборудования должен использоваться отдельный пункт с автоматами и общим рубильником;

- все соединения ПЭВМ и внешнего оборудования должны проводиться при отключённом электропитании.

Основные мероприятия, направленные на устранение причин травмы включают:

1. систематический контроль за состоянием изоляции электропроводов, кабелей и т.д.

2. разработка инструкций по техническому обслуживанию и эксплуатации средств вычислительной техники и контроль за их соблюдением;

3. соблюдение правил противопожарной безопасности;

4. своевременное и качественное выполнение работ по проведению планово-профилактических работ и предупредительных ремонтов.

## **5.2 Эргономические условия работы на ПЭВМ**

### **5.2.1 Требования к помещениям для работы с ПЭВМ**

Отрицательное воздействие на персональный компьютер заключается в том, что к концу дня операторы чувствуют головную боль, боль в глазах, тянут боль в мышцах шеи, рук, спины, зуд кожи лица. Со временем это приводит к мигрени, частичной потере зрения, сколиозу, воспалению кожи и т. Д. Люди, которые сидят на ПК в течение 2-6 часов в день, увеличивают шансы получить

заболевание верхних дыхательных путей, получить неожиданное сердце атаки или удара. Результаты показали, что наиболее «рискованными» пользователями ПЭВМ являются дети и беременные женщины СанПиН 2.2.2 / 2.4.1340-03 [23].

Санитарно-гигиенические требования к помещениям для работы ПК в соответствии с СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 [23] заключаются в следующем: рабочие места с ПК должны быть расположены во всех комнатах, кроме подвалов с окнами, обращенными к северу и северо-востоку. В зависимости от ориентации окон рекомендуется следующая окраска стен и пола комнаты:

- окна ориентированы на юг - стены зеленовато-голубого или светло-голубого цвета, пол - зелёный;

- окна ориентированы на север - стены светло-оранжевого или оранжево- жёлтого цвета, пол - красновато-оранжевый;

- окна ориентированы на восток и запад - стены жёлто-зелёного цвета, пол зелёный или красновато-оранжевый.

Пол комнаты должен быть ровным, антистатическим. Отделка помещений полимерными материалами осуществляется только с разрешения Госсанэпиднадзора. В учебных помещениях запрещено использовать полимерные материалы (древесностружечная плита, ламинированный пластик, синтетическое ковровое покрытие и т. Д.), Которые выделяют вредные химические вещества в воздух. В комнате должен быть медицинский аптечка и огнетушитель с диоксидом углерода. Расстояние между сторонами мониторов составляет не менее 1,2 м. В оконных проемах должны быть приспособления для регулировки (шторы, шторы). Компьютер должен быть настроен так, чтобы

экран не пропускал прямой свет (иначе экран будет светиться, что вредно для экрана). Оптимальное положение при работе - боком к окну, предпочтительно слева.

### **5.2.2 Общие требования к организации и оборудованию рабочих мест пользователей ПЭВМ**

Конструкция рабочего стола обеспечивает оптимальное размещение оборудования, используемого на рабочей поверхности. Высота рабочей поверхности стола составляет 725 мм. Следует учитывать модульные размеры рабочей поверхности стола для ПК, на основе которых должны быть рассчитаны расчетные размеры: ширина 800, 1000, 1200 и 1400 мм,

Глубина 800 и 1000 мм с неконтролируемой высотой. Рабочий стол должен иметь пространство для ног высотой не менее 600 мм, ширину не менее 500 мм, глубину на уровне колена не менее 450 мм и не менее 650 мм на уровне удлинённых ног. Дизайн рабочего стола поддерживает рациональное рабочее положение при работе с ПК, позволяет изменять позу, чтобы уменьшить статистическое напряжение мышц шейно-плечевой области и обратно, чтобы предотвратить усталость. Конструкция рабочего кресла должна обеспечивать:

- ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм;
- поверхность сиденья с закруглённым передним краем;
- регулировку высоты поверхности сиденья в пределах 400-550 мм и углам наклона вперёд до 15° и назад до 5°;

- высоту опорной поверхности спинки  $30\pm 20$  мм, ширину – не менее 380 мм и радиус кривизны горизонтальной плоскости – 400 мм;
- угол наклона спинки в вертикальной плоскости в пределах  $\pm 30^\circ$ ;
- стационарные или съёмные подлокотники длиной не менее 250 мм и шириной – 45-70 мм;
- регулировку подлокотников по высоте над сиденьем в пределах  $230\pm 30$  мм и внутреннего расстояния между подлокотниками в пределах 350-500 мм.

Рабочее место пользователя ПК должен быть оснащен подножкой с шириной не менее 300 мм, глубину не менее 400 мм, регулировка высоты в диапазоне до 150 мм и углом наклона опорной поверхности носителя до 20. Поверхность подставки должна быть гофрирована и иметь кромку на 10 мм вдоль передней кромки.

Клавиатуру следует размещать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, обращенного к пользователю, или на специальной регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделенной от основной столешницы.

Для работы с ПЭВБ лица, прошедшие предварительное и периодическое медицинское обследование, тест знаний для третьей группы допуска по электробезопасности, который изучил инструкцию и подписал в «Журнале брифинга о правилах охраны труда на рабочем месте». Для обеспечения оптимальной производительности, сохранения здоровья пользователей компьютеров во время смены установлен следующий график работы: для учителей, сотрудников, студентов (старших курсов), не более двух часов

работы с обязательным перерывом не менее 20 минут, общая продолжительность работы - не более 4 часов в день.

### **5.2.3 Режим труда и отдыха при работе с ПЭВМ**

Согласно СанПиНу, режимы работы и отдыха при работе с ВДТ и ПЭВМ зависят от типа и категории рабочей активности. В то же время виды рабочей деятельности делятся на три группы (А, Б и В). В группу А проводится работа по считыванию информации с экрана ВДТ с предварительным запросом; В - работа по вводу информации; В - творческая работа в режиме общения с компьютером. Для этих видов деятельности действуют три категории (I, II и III): тяжесть и интенсивность работы с ВДТ и ПЭВМ. Например, для группы А категории I-III определяются общим количеством символов, считанных для рабочая смена, но не более 60 000 знаков в смену (СанПиН 2.2.4, 548-96 [26]).

Чтобы обеспечить оптимальную производительность и сохранить здоровье профессиональных пользователей, в течение рабочей смены должны быть установлены регулируемые перерывы. После каждого часа работы на компьютере вы должны сделать перерыв на 5-10 минут. Глаза начинают уставать через час после непрерывной работы с компьютером. Вы можете удалить усталость глаз даже во время работы в течение нескольких секунд поворачивая их по часовой стрелке и назад. Это должно чередоваться с легкими гимнастическими упражнениями для всего тела. Не допускается ежедневная

работа с высокой интенсивностью и с нейро-эмоциональным стрессом 12 или более часов.

Обучение и обучение персонала, разработка инструкций по охране труда должны соответствовать требованиям. В инструкциях должны быть указаны безопасные методы, порядок приема на работу, перечисленные опасные и вредные факторы производства. Для самостоятельной работы с VDT и ПК допускаются сотрудники, которые изучили процедуру их работы, которые прошли начальную инструкцию на рабочем месте и сертификацию электрической безопасности с присвоением второй квалификационной группы.

### **5.3. Экологическая безопасность (Охрана окружающей среды)**

Под охраной окружающей среды понимается набор международных, государственных и региональных правовых актов, правил и стандартов, которые приносят общие юридические требования к каждому конкретному загрязнителю и обеспечивают его заинтересованность в удовлетворении этих требований, конкретные природоохранные меры для реализации этих требований.

Охрана окружающей природной среды складывается из:

- правовой охраны, формулирующей научные экологические принципы в виде юридических законов, обязательных для исполнения;
- материального стимулирования природоохранной деятельности, стремящегося сделать её экономически выгодной для предприятий;

- инженерной охраны, разрабатывающей природоохранную и ресурсосберегающую технологию и технику.

Основными принципами охраны окружающей среды являются:

- приоритет обеспечения благоприятных экологических условий для жизни, труда и отдыха населения;

- научно обоснованное сочетание экологических и экономических интересов общества;

- учёт законов природы и возможностей самовосстановления и самоочищения её ресурсов.

Деятельность человека наносит ущерб окружающей среде, и поэтому общество сталкивается с задачей сделать это воздействие наименее пагубным.

В процессе работы в компьютерных центрах, а также в обычной жизнедеятельности человек является источником твердых бытовых отходов. Эти отходы, как пищевые, так и промышленные, сильно загрязняют окружающую среду.

Как правило, бумага, диски, строительные отходы, коробки и т. д. Действуют как промышленные отходы. Этот мусор с другими отходами экспортируется на территории, предназначенные для хранения бытовых отходов.

Другие факторы, влияющие на окружающую среду, отсутствуют в процессе создания НИР.

## 5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Пожар в организации - большая опасность, так как она связана с большими материальными потерями. Огонь может начаться с взаимодействия легковоспламеняющихся веществ, источников окисления и воспламенения.

Пожар может возникнуть из-за:

- неисправные провода, розетки и переключатели, которые могут привести к короткому замыканию или поломке изоляции;
- использование в помещении электронагревателей с открытыми нагревательными элементами;
- использования повреждённых электроприборов;
- попадания молнии в здание;
- неаккуратного обращения с огнём и несоблюдения мер пожарной безопасности.

Согласно классификации производств по пожароопасности (ППБ-03), в зависимости от характеристик веществ, используемых в производстве, и их количества, помещения делятся на категории А, Б, В, Г, Д.

Данное номер относится к категории В, поскольку горючие материалы и материалы находятся в твердом состоянии без выброса пыли.

Для тушения пожара есть пожарные бочки, внутренние противопожарные водопроводные трубы, огнетушители и сухой песок.

Для тушения пожара есть пожарные бочки, внутренние противопожарные водопроводные трубы, огнетушители и сухой песок.

Вода используется для тушения пожаров в помещениях программистов только в случае опасности повреждения или полного отказа дорогостоящего оборудования. В этом случае, если это возможно, необходимо защитить компьютеры от влаги.

Пожаров широко используются для тушения пожаров на начальных этапах. Поэтому в департаментах с ПК используются огнетушители с диоксидом углерода, преимуществом которых является высокая эффективность пожаротушения и безопасность электронного оборудования.

Благодаря диэлектрическим свойствам двуокиси углерода эти огнетушители могут использоваться даже в том случае, если электроинсталляция не может быть немедленно отключена.

Для предотвращения возникновения пожара проводятся специальные семинары с работниками здания, где они знакомятся с основами пожарной безопасности и обучением при работе с первичными средствами пожаротушения.

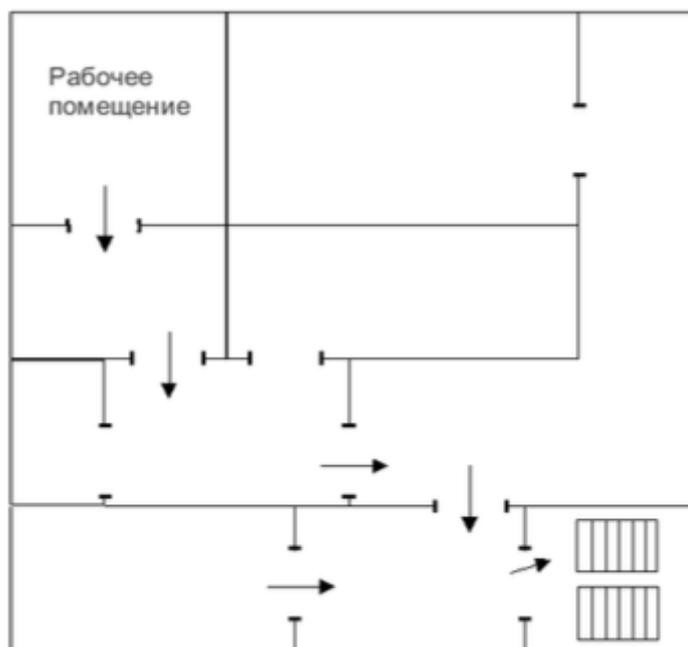


Рисунок 12 – План эвакуации

При наличии небольшого огня вы можете использовать импровизированные инструменты и самостоятельно начать огонь. В противном случае, если огонь не может быть погашен, необходимо, если это возможно, обесточить помещение, вызвать пожарную бригаду, а также, согласно плану эвакуации (Рисунок 12), вывести людей на улицу.

### 5.5 Заключение социальной ответственности

В этой статье мы рассматриваем безопасность и здоровье труда при изучении тонкой колебательно-вращательной структуры спектра поглощения молекулы  $SO_2$ : полос  $\nu_2$ . Были выявлены вредные и опасные факторы рабочей зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них.

Социальная ответственность представляет собой диалектическую связь между человеком (работодателем) и обществом (работником), характеризующимся взаимными правами и обязанностями по выполнению социальных норм и налагающим влияние в случае его нарушения. Основываясь на соображениях безопасности при выполнении работы, было ясно, что студенты - будущий лидер - должны нести социальную ответственность за принятые решения.

## Заключение

В данной работе было проведено исследование колебательно-вращательной полосы  $\nu_2$  молекулы  $^{32}\text{SO}_2$ . В результате анализа колебательно-вращательной структуры полосы  $\nu_2$  молекулы  $^{32}\text{SO}_2$  на основе метода комбинационных разностей было получено около 2500 энергетических переходов, соответствующие 500 энергии верхнего колебательного состояния. Максимальное значение квантовых чисел составило  $J = 50$  и  $K_a = 18$ .

На основе полученной из экспериментального спектра информации, была осуществлена процедура варьирования параметров эффективного гамильтониана. В результате был получен набор из 14 параметров, который воспроизводит исходные колебательно-вращательные энергии со среднеквадратичным отклонением  $1,5 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ , что соответствует экспериментальной точности.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 1. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – 248 с.
2. Wallace P. J. Volcanic SO<sub>2</sub> emissions and the abundance and distribution of exsolved gas in magma bodies // Journal of Volcanology and Geothermal Research. – 2001. – V. 108. – p. 85–106
3. Self S, Rampino M. R., Barbera J.J. The possible effects of large 19th and 20th century volcanic eruptions on zonal and hemispheric surface temperatures // Journal of Volcanology and Geothermal Research. – 1981. – V. 11. – p. 41–60
4. Rinsland C. P., Gunson M. R., Ko M.K.W., Weisenstein D.W. , Zander R., Abrams M.C., Goldman A., Sze N.D., Yue G.K. H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> photolysis: a source of sulfur dioxide in the upper stratosphere // Geophys Res Lett. – 1995. – V. 22. – p. 1109–12
5. McCormic M.P., Thompson L.W., Trepte C.R. Atmospheric effects of the mount pinatubo eruption // Nature. – 1995. – V. 373. – p. 399–404
6. Welsch N., Schwab J. Erde und leben. - Berlin: Springer, 2017
7. Huang X., Schwenke D.W., Lee T.J. Empirical infrared line lists for five SO<sub>2</sub> isotopologues: 32/33/34/36S16O<sub>2</sub> and 32S18O<sub>2</sub> // Mol. Spectrosc. – 2015. – V. 311. – p. 19–24
8. Charlson R.J., Anderson T.L., McDuff R.E. The sulfur cycle – Global biogeochemical cycles. – San Diego: Academic

9. Lovas F.J.. Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XXII. Sulfur dioxide (SO<sub>2</sub>) // J Phys Chem Ref Data. – 1985. – V. 14. – p. 395–488
10. Coudert L., Maki A.G., Wm B.O. High-resolution measurements of the  $\nu_2$  and  $2\nu_2 - \nu_2$  bands of SO<sub>2</sub> // J Mol Spectrosc. – 1987. – V. 124. – p. 437–42
11. Flaud J.M., Perrin A., Salah L.M., Lafferty W.J., Guelachvili G. A reanalysis of the (010), (020), (100), and (001) rotational levels of <sup>32</sup>S<sup>16</sup>O<sub>2</sub> // J Mol Spectrosc. – 1993. – V. 160. – p. 272–8
12. Huang X., Schwenke D.W., Lee T.J., Empirical infrared line lists for five SO<sub>2</sub> isotopologues: <sup>32</sup>S/<sup>33</sup>S/<sup>34</sup>S/<sup>36</sup>S<sup>16</sup>O<sub>2</sub> and <sup>32</sup>S<sup>18</sup>O<sub>2</sub> // Journal of Molecular Spectroscopy. – 2015. – V. 311. – p. 19-24
13. Muller H.S.P., Brunken S. Accurate rotational spectroscopy of sulfur dioxide, SO<sub>2</sub>, in its ground vibrational and first excited bending states,  $\nu_2 = 0, 1$ , up to 2 THz // Journal of Molecular Spectroscopy. – 2005. – V. 232. – p. 213-222
14. Давыдов А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М.: Наука, 1975. – С. 703.
15. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. : Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 2. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – 248 с.
16. Г. Герцберг.: Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. – Москва: ИЛ, 1949.
17. Ефимова А.И., Зайцев В.Б., Болдырев Н.Ю., Кашкаров П.К. Инфракрасная фурье-спектрометрия: Учебное пособие. – М.: Физический факультет МГУ, 2008. – 133 с.

18. Watson. J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules // J. Chem. Phys. – 1967. –V. 46 – pp.1935-1949
19. Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Horneman V.M. Re–analysis of the (100), (001), and (020) rotational structure of SO<sub>2</sub> on the basis of high resolution FTIR spectra // J Quant Spectrosc Radiat Transf. – 2013. – V. 130. – p. 220–32
20. Watson. J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules // J. Chem. Phys. – 1967. –V. 46 – pp.1935-1949
21. Видяев И.Г., Серикова Г.Н., Гаврикова Н.А., Шаповалова Н.В., Тухватулина Л.Р., Криницына З. В. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие, Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2014, 36 с.
22. IS CSR 26000:2011 Социальная ответственность организации.
23. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.
24. ГОСТ 12.0.003-74. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.
25. ГОСТ 12.1.005-88 (с изм. №1 от 2000 г.). ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (01. 01. 89).
26. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
27. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.

28. ГОСТ 12.1.019-79. ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

29. ГОСТ 12.1.038-82. ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.

30. ГОСТ 12.1.004-91. ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования.

31. ГОСТ 12.1.003-83 ССБТ. Шум. Общие требования (01. 07. 92).